メ シ ア

量子力学

1

小出昭一郎
田村二郎 訳

東京図書株式会社

ALBERT MESSIAH

MÉCANIQUE QUANTIQUE

⟨DUNOD⟩ Paris 1959

序　文

現在，物理学のなかで，量子力学をよく知らずにまともに取り組むことのできるような分野はすこししかない．本書の説明は，学生諸君にも受けいれてもらえるほど十分に簡単であって，しかも，一人前の物理学者の研究にも役立ちうるほどに十分完璧であることを期した．

本書は1953年以来サクレイの原子核研究所（Centre d'Études Nucléaires）で行なった講義をもとにしてできたものである．学生諸君や同僚研究者諸氏との数多くの議論は，説明の仕方を明らかにするのに非常に役に立った．原稿の一部をお渡しした多くの方々からは，すすんでいろいろの批判をいただいた．そのうち Edmond Bauer と Jean Ullmo の両氏からは，諸原理の説明の仕方に関して有益な御注意を頂戴したことを記しておきたい．Roger Balian 氏には，原稿のうちの多大の部分を慎重に検討し改善すべき点を多数指示して下さったことに対し，ここで特に深い謝意を表したい．最後に，たくさんの章の本文や計算をチェックし，校正刷りを見るのを手伝ってくれた学生諸君に感謝したい．

各章の終りにつけた問題は，教育的価値のみでなく，関心に値するいくつかの性質を特記する目的で選んだものである．問題のなかに相対的にむずかしいものが一部含まれているのはこのためである．

引用文献としてあげた本や論文は，読者が本文の該当部分をより完全により深く理解するための助けになるものである．いろいろな事項の完全な文献目録をつくることは問題にしなかった．それには一冊全部を費しても不十分であろう．

1958年10月

アルベール・メシア

訳者まえがき

メシアの本が量子力学の教科書として非常にすぐれたものであることは，原書が出ると間もなく英訳が **North Holland** 社から出され，その後ペーパーバックスの廉価版にまでなって広く世界中で読まれている，という一事をもってしても明らかであろう．量子力学を多少なりとも実際に使おうという人が机上に備えておくべき標準的な本として何がいいかと問われたならば，われわれは躊躇なくこのメシアの本をあげることができる．

量子力学を学ぶ人がまずぶつかる困難は，古典物理学とはまったく異なるその概念構成である．使って馴れることも確かに必要ではあるが，かなり計算などをやっている研究者のなかにすら，基本的な理解に欠陥のある人を見いだすことが珍らしくないことを考えると，実用一点ばりの本で計算だけに習熟することには大いに疑問を感じる．本書は，量子論の基礎に関し相当つっこんで詳しく，しかも偏らない説明を与えており，その点ではどんな他の本にくらべてもけっしてひけをとらない．もちろん，量子力学の統計的解釈にしたがうことを最後まで承服しなかったアインシュタインのような例もあるから，本書をもってしても納得に至らない読者があってもしかたがないし，それが困ったこととも断言できないが，とにかく最初に基礎概念について十分に考えておくことが何より重要である．

その場合，量子力学の解釈には今もって異論があるほどなのであるから，最初に選ぶ本には相当な慎重さが必要である．訳者の一人は，数年前ジュネーブ大学滞在中に，そこの **Jauch** という教授と量子力学の本について話をしたことがある．**Jauch** 教授は量子論の基礎を掘り下げる研究をしている人であり，のちに自らも一冊の本を書いているくらいであるから，いろいろな本に対してかなり手厳しい批判を加えた．そのやかましい彼が文句なしに勧めたのがこのメシアの本なのである．

量子力学もその建設以来すでに半世紀近くたった．それは広く諸問題に応用されて輝かしい成果を収めてきたが，そのことによって方法的にもいろいろと開発が進んだ．したがって，量子力学を自分のものとして使おうというからには，これらの方法のすべてとはいわないまでも，かなりのものに通じていることが不可欠である．そういう立場から見たときにも，伝統的な方法から現代的な手段までを本書ほど広汎に取り入れた教科書は他に例

を見ない．著者もその“序文”に記しているように，本書は研究者にとっても量子力学のハンドブックとして十分に役立つ内容の本である．

以上のような理由から，あえてわれわれはこの大冊の翻訳に取り組んだのであるが，本書がかなり数学的な内容を含むので，物理学者と数学者の二人三脚という訳者のとり合わせによって，多少なりとも特色が出せたのではないかと思っている．また，物理学のいわば素人という立場からみれば気になる難解な箇所には訳注をつけたりしたので，そういう点でも意味があると思う．翻訳はもちろんフランス語の原本から行なったが，英訳本も多少参考にした．訳文が生硬な直訳調にならないようにかなり気を使ったが，あまり原文から離れることは避けるよう留意した．ことわりなしに訳者が言葉を補ったところもあるが，すこし長く補ったところは〔　〕で囲んでおいた．

この拙い訳書が，日本の好学の士のお役に立ち，量子力学を学び，かつ使う多くの方々の座右に備えられるようになれば，訳者にとっては望外の幸せである．

1971年5月

小出昭一郎
田村二郎

総　目　次

第1巻目次

序　　文

訳者まえがき

第1部　量子力学の形式とその解釈

第1章　量子論の起こり

第2章　物質波とシュレーディンガー方程式

第3章　1次元の量子系

第4章　波動－粒子二重性の統計的解釈と不確定性関係

第5章　波動力学の形式論の展開とその解釈

第6章 古典近似と WKB 法

第7章 量子論の形式的一般論

A. 数学的な枠組

第8章　量子論の形式的一般論
B.　物理的現象の記述

……彼はコペンハーゲンへ旅行する
ことを勧め，その面倒をみてやった．
《カンディード》

第 1 部

量子力学の形式とその解釈

前頁に引用されている《カンディード》は，フランスの思想家ヴォルテール（1694～1778）の哲学的な短篇小説．コペンハーゲンはボーアの研究所があり，量子論のメッカともいうべきところ．《カンディード》にこのとおりの文章は見いだされないので，パロディーと思われる．

第1章　量子論の起こり

§1. 序　　説

古典的原則――これは20世紀の初めまで物理学者たちによってひろく採用されたものであるが――にしたがうと，ある物理系の変化を述べたいときには，その系にいくつかの量すなわち力学変数を結びつける．これらの変数はすべて，各瞬間にはっきり決まった値をとり，この値を全部与えると，その瞬間における系の力学的状態が定まる．さらに，与えられた初めの瞬間における物理系の状態を知るならば，時の経過による系の変化は完全に決められるということを承認する．数学的には，力学変数が時刻の関数として1階の微分方程式系にしたがうという事実によって，この基本公理はいっそう正確な形に言い表わされる．それゆえ，古典理論物理学のプログラムは，問題になっている系の力学変数を数え上げ，つぎに実験的観測に合うようにその変化を予想する運動方程式を見つけることにあった．

ニュートンによる理論力学の定式化から19世紀の末に至るまで，このプログラムの実行は驚くべき成功のうちにつづけられた．新しい実験上の発見は，あるときは新しい変数と新しい方程式の導入により，あるときは古い方程式の修正により，すべて理論の面に移され，これによって新しく観測された現象を一般的な構図のなかに統一することができた．この期間のすべてを通して，どんな実験的事実も，どんな発見も，このプログラム自体の正当さを疑うことを許さなかった．それとはまったく反対に，古典物理学はもっと大きな単純さともっと大きな統一に向かって，絶えまなく進んできた．このしあわせな発展は1900年ごろまでつづいた．その後，微視的な(1) スケールの現象についての知識が正確になるにつれて，古典理論はいくつかの困難や矛盾にぶつかり，その数はしだいに増していった．原子や原子以下のスケールの現象は古典的な原則そのものの枠のなかに入らないこと，そしてそれらの説明はまったく新しい原理に基づかなければならないことが，急速に

(1)　この本でしばしば使われる術語“微視的”と“巨視的”の意味を正確にしておくことはたいせつである．われわれは微視的なスケールを，原子または原子以下の現象のスケールと定義する．そこでは最大限数オングストローム(1オングストローム(Å) = 10^{-8}cm) の長さが問題になっている．巨視的なスケールとは，肉眼やふつうの顕微鏡で観察される現象のスケール，つまり最高の精度がミクロン (10^{-4}cm) 程度のものである．

明らかになった．これらの新しい原理の発見は，数多くの模索を通じてだんだんに行なわれ，ようやく1925年ごろになって，量子力学の建設により，われわれは微視的な現象についての一貫した理論を手にすることになる．この理論の起源が本章の主題になっている．

古典理論物理学全体の概観を描いたあとで，古典的な概念の放棄を正当化する現象のうち，主なものをいくつか説明する．読者はこれらの現象をすでに知っているものとする(2)．そこでわれわれはその本質的なかたちを思い出すのにとどめ，何よりもまず古典理論と矛盾する点を強調する．

本章の終りは，これらの現象を説明しようとした最初の試み，前期量子論の名で知られるもの，についての簡単な解説に費される．

I．古典時代の終り

§2. 古典理論物理学

古典時代の終りには，物理学のいろいろな分野が，一般的な，筋道のとおった一つの理論的構造にまとめられた．その大筋はつぎのとおりである．宇宙において二つのカテゴリーの対象，**物質**と**輻射**とを区別する．物質は，ニュートンの理論力学の法則にしたがって完全に位置づけられる粒子からできている．各粒子の状態は各瞬間に，それの位置と速度(または運動量)，つまり全部で6個の力学変数によって定められる．輻射はマクスウェルの電磁気の法則にしたがう．その力学変数は——無限個あって——空間の各点における電磁場の成分である．物質とは異なり，輻射を空間のせまい範囲にかたまった(局在する)粒子に細分して，時の経過にしたがって変化するあいだその局在性を保存することはできない．それとは反対に，輻射は，よく知られた干渉や回折の現象において特にはっきり現われるように，波としての挙動を示す．

物質の粒子論は19世紀のあいだ中発展してやまなかった．はじめは天体や巨視的な大きさの物体の力学に制限されていたが，化学者たちによって提唱された原子説が立証されるにつれて，微視的なスケールの物質の変化をも支配する基礎理論としてのすがたを，だんだん現わしてきた．物質をばらばらの分子に分けてそれらの相互作用を調べることによって，この仮説を直接に確かめることはできなかったが，物質の巨視的な性質がそれを構成する粒子の運動法則から出てくることを示すことによって，間接にこの仮説を正当化する

(2) これについての詳しい説明は，原子物理学を取り扱った書物に見られる．たとえば：M. Born, *Atomic Physics*, 第6版，Blackie, Glasgow, 1957 (邦訳；ボルン《現代物理学》鈴木・金関訳，みすず書房)，または G. Bruhat, *Optique*, Masson, Paris, 1954.

ことはできた．数学的には，これは非常に複雑な問題に関係する．なぜなら，この仮説において，巨視的な量というのは，非常に多数の自由度をもつ系の，然るべき力学変数の平均値として与えられるからである(3)．このような系の変化の方程式を厳密に解くことは思いもよらないので，統計的研究法に訴えることになる．こうして一つの新しい原理，統計力学が生まれそして発展した．その結果により，特に気体の研究（気体の運動論）と熱力学（統計熱力学）において，定性的に，また計算が可能な範囲では定量的に，物質の粒子論の正しさを確かめることができた(4)．

同時に，**輻射の波動論**も強い支持をうけるようになった．光学の領域では，光の波動性または粒子性に関する昔からの論争が，19世紀の前半に打ち切られた．この時期には，波の伝播の問題の取り扱いに決定的な進歩がいくつかあり(フレネル)，それによって波動説の結果をすべて調べあげ，幾何光学をも含めて，既知の光の現象の全部をこの仮設に基づいて説明することができた．その間に，電磁気現象の研究も急速に発展した．決定的な進歩はマクスウェルにより，彼が1855年に電磁気の基礎方程式を立てたときになされた．この方程式に基づき，彼は電磁波の存在を予見し——この予見はのちに電波の発見（ヘルツ）により，みごとな形で立証される——また光波を電磁波の特殊なものとみなした．こうして彼は光学と電磁気学との統一を実現したのである．

19世紀の末における古典的プログラムの成功は印象的である．既知の物理的現象はすべて，物質と輻射についての一般的な理論から説明されるかと思われた．この説明が見いだされない場合はいつでも，失敗の原因は問題を解く際の数学的困難にあるとし，基礎方程式の形式に疑いをもたなかったのも当然である．この理論において一番いちじるしい点は，その驚くべき統一の度合である．科学のいろいろな分野を統一しようという望みは，つねに物理学者たちの最も実り多い配慮の一つであった．実は，当時の物理学者たちは古典理論に，それが現実にもっている以上の統一を与えようとしたのである．実際，波の伝播は電磁気に限られた現象ではない．振動の研究は初め物質の振動に関して行なわれ（振動する弦，液体の表面波など)，音響現象の波動的性格は，光の現象のそれよりも先に明らかにされた．ただし，物質の内部に波動が存在することはけっして粒子説と矛盾しな

(3) モルあたりの分子の数N（アヴォガドロ数）は $N=6.02\times10^{23}$ であることを思い出そう．Nの最初の精密な決定は，ロシュミット（1865）により，気体の運動論に基づいて行なわれた．

(4) 統計力学のすべての推論には統計性の仮説，粒子的カオス（混乱状態）の仮説が介在していることに注意する必要がある．統計的方法そのものを捨てることなしには，これから逃れることはできない．この仮説は直観的には正しいように見えるが，その厳密な証明（エルゴード定理）は非常に微妙であることが明らかにされ，なお論議の対象になっている．

い．なぜならそこでは，適当な力の法則を採用すれば，微視的な運動の法則からうまく説明されるような巨視的現象が問題になっていたからである．これとの類推によって，古典物理学者たちは電磁波に一つのにない手を与えた．それは一種の物質的な流体であって，彼らはそれにエーテルという名をつけたが，その構造や力学的な性質は明確にされなかった．この物質は基本的な実体で，ニュートン力学の諸原理ならびにいくつかの力の法則にしたがい，その結果として，ある条件の下ではいろいろな波動現象の起こる媒質となることができ，その一つが電磁振動である．

この概念は，あとで完全に棄てられるのであるが，その当時において，ある一連の実験を行なわせる動機になった．これらの実験は，エーテルの性質について多くのデータを与えてはくれず，それどころかそのうちの一つは古典物理学にかなり根の深い混乱をひき起こすことになった．有名なマイケルソン＝モーリーの実験（1887）がこれであって，この実験は，エーテルに相対的な地球の運動を明らかにすることを目指して，光の伝播の地球に対する速さが，伝播の方向によってどのように異なるかを示そうとしたものである．人も知るように，この実験の結果は否定的である．多かれ少なかれ技巧的な説明がいくつか試みられたのち，この明白なパラドックスは，1905年アインシュタインにより，**相対性理論**の枠のなかで決定的に説明された．この理論は，時間と空間の概念についての批判的な分析によるものであって，その結果は，絶対時間という概念が棄てられ，ニュートン力学の公理の一部が否定されるという事態をひき起こした．事実，ニュートン力学は相対論的力学の近似，粒子の速さが光の速さ c にくらべて無視される範囲でだけ成り立つ近似にすぎない．ここでは相対性原理には立ち入らないことにする．この本の終りで，相対論的量子力学を学ぶ際に，これにたちもどる機会があるであろう．たいせつなのは，これによって，先に定義した古典的な原則にも古典的なプログラムにも，疑問は生じなかったという点に注意することである．

§3. 微視的現象についての知識の進歩と物理学における量子の出現

世紀の変わる頃，実験家たちの努力は2種の密接に結びついた問題に向けられた．第一は物質の微視的な構造を詳しく分析することであり，第二は物質の粒子間の相互作用と，粒子と電磁場の相互作用を決めることである．

物質の構造に関する最初のデータは，希薄な気体のなかの放電によって生じる放射線の研究から得られた．すなわち陰極線とカナル線であって，当然のことながら，程度の差はあれ高速度を与えられた荷電粒子の噴流と解釈された．こうして陰極線粒子として**電子**が発見された（J. J. トムソン，1897）．電磁場があるときの電子の挙動は実験的に定められ，電子と電磁波との相互作用について完全な理論が打ち立てられた（ローレンツの電子

論)(5).

長いあいだ便利な作業仮説とみなされていた原子と分子の存在そのものも，だんだん現実的なものとして受け入れられてきた．その最も説得力のある証明は，液体や気体のなかに浮かんだ非常に小さい粒子の無秩序な運動であるブラウン運動の研究によって与えられた．この運動は，粒子がその周囲にある分子から受ける多くの衝突によって生じ，ある仕方で分子の動きを大きなスケールに再現しているので，分子そのものの運動の統計的法則と定量的に結びつけられた(アインシュタイン，スモルコフスキー，1905)．ペラン(1908)の組織的な実験はこの仮説を立証し，アヴォガドロ数についての精密な，互いによく一致するいくつかの値を定めた(6)．この決定的な進歩ののち，物理学者たちは原子的な粒子あるいは原子以下の粒子の存在について，もはや疑いをもたなくなり，われわれは，個々の微視的な現象を観察したり微視的な粒子を一つ一つ数えたりすることを可能にする実験技術が，ますます多く，ますます完全につくられてゆくのを，目のあたりに見てきた (1910年ミリカンによる電気素量の測定，1912年ウィルソン霧箱における荷電粒子の軌跡の最初の観測，1913年最初のガイガー管)．これら《直接の》観測技術は絶えまなく開発され，今日実験家たちが微視的現象を探索するときに駆使する装備は，ほとんど全部つくられた．

しかしながら，物理学の新しい一章は放射能の発見とともに開かれた (1896)．これは原子核の性質の最初の顕現である．これ自体も重要であるが，その発見は物理学者の手に，原子構造を調べるための強力な手段である α 線を与えた．α 線は高速を与えられたヘリウム核からできている．いろいろな目標に α 線を当てることにより，ラザフォード(1911)は原子による α 粒子の散乱について組織的な研究を行ない，その結果最初の近代的な原子像を導き出すに至った．

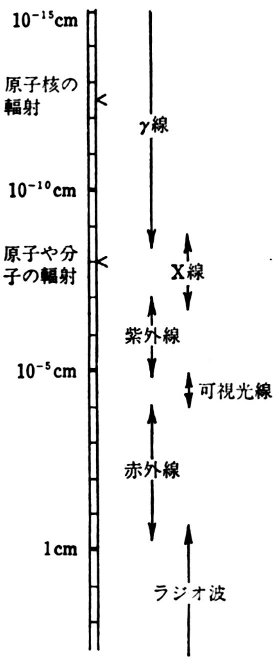
ラザフォードの原子はわずかな大きさ (10^{-13} ないし 10^{-12}cm) をもつ中心の核と，そのまわりを回るある個数 Z の電子とから成る．原子の質量のほとんど全部は核に集まっている．核は正の電荷 Ze をもち，とりまく電子の全電荷 $-Ze$ と正確に釣りあい，その結果，全体は電気的に中性となっている．このようにラザフォードの原子は小型の太陽系に似ており，ここでは重力が電気力にかわっている．その作用，すなわち核のクーロン引力と相互のクーロン斥力によって，電子は核のまわりに安定した軌道を描き，そのひろがりは原子の大きさ，つまり 10^{-8}cm 程度である．

原子についての知識が進むにつれて，物質の粒子的性格が立証されたように思われた

(5) L. ROSENFELD, *Theory of Electron*, North-Holland, Amsterdam, 1951 を参照.

(6) J. PERRIN, *Les Atoms*, Presses Universitaires, Paris, 1948.

が，一方では，X線の発見（レントゲン，1895）によって既知の電磁波のスペクトルが完全になり，短い波長の方までひろげられた．X線の波動的性格は結晶中の回折の実験によって確証された（フォン・ラウエ，1912）．手落ちなくするためには，放射性物質が出すγ線にも言及せねばならない．その電磁的性質はずっとあとまで認められなかったものである．1·1 図は，こうして一つのものとなった電磁輻射の波長の段階を示すものである．



1·1 図 電磁波の波長のスケール

輻射のスペクトル分析はその範囲を拡大すると同時に，ますます精密になり，物質による光の放出，散乱，吸収の問題について，言葉をかえれば，微視的なスケールにおける物質と輻射のあいだの相互作用について，驚くほど大量の資料を蓄えることができた．先に述べたローレンツの電子論，電磁場と相互に作用する荷電粒子の理論によれば，これらすべての現象は，原理的に予測されるものである．古典理論と実験とのあいだの最初の不調和が明らかになったのは，まさにこの理論による予測とこの一群の実験結果とを比較しているときなのであった．

最初に難点が現われたのは，物質と熱力学的平衡にある電磁輻射のスペクトル分布を調べたときである．典型的な場合は**黒体**のそれである．定義によると，黒体とは，自身が受ける輻射をすべて吸収する物体である．きわめて一般的な熱力学の理論によれば，黒体の発する輻射はただこの物体の温度だけで定まり，その他のすべての性質にはよらない．それゆえ，黒体の発する輻射の強さのスペクトル分布は，統計熱力学の方法によって，物質と輻射のあいだの相互作用に関する一般法則から導きうるはずの基本的な式である．ところが，古典理論から導き出された式は実験と大きく食いちがっていた．1900年に，プランクは物質と輻射のあいだの相互作用に関する古典法則を捨てて，この難点を除くに至った[7]．彼は，物質と輻射のあいだのエネルギーの交換は，連続的な仕方でなされるのではなく，とびとびで分割できない量，すなわち**エネルギー量子**によって行なわれるという仮説を提出した．そしてエネルギー量子は必ず輻射の振動数νに比例すること，つまり

$$\varepsilon_\nu = h\nu$$

(7) 黒体輻射の理論の詳しい研究については，前掲の M. BORN の著書を参照．

を示し，比例定数を適当に調整することによって，実験による分布と一致するスペクトルの式を得た．それ以来この定数 h は**プランクの定数**の名で知られている．それは作用の次元（[エネルギー×時間]，すなわち［運動量×長さ]）をもつ．今後は通常は定数

$$\hbar=\frac{h}{2\pi}=1.054\times10^{-27}\ \text{エルグ・秒}$$

を使うであろう．

発表当時，プランクの仮説は受け入れ難いものとみなされ，物理学者たちはほとんど満場一致で，そのなかに幸運な数学的技巧以上のものを認めることを拒み，その技巧もいつかは古典的原則の枠のなかで説明されるであろうと思った．プランクの理論の成功でさえ，物質と輻射のあいだのエネルギーの交換が，微視的なスケールでは量子によって起こるということの，否定できない証明とは考えられなかったのである．プランクの分布法則はこの仮説から統計的方法によって導かれた巨視的な法則である．それはこの仮説に対して間接の証明を与えるにすぎない．量子仮説そのものの正しさに疑いがもたれたのは，ちょうど原子仮説が微視的なスケールで直接に確かめられなかったため，長いあいだその正しさに疑いがもたれたのと似ている．しかしながら，プランクの仮説は一連の実験的事実のすべてによって確認され，完成されるに至った．これらの実験的事実により基本的過程を直接に分析することができ，古典理論では連続的な変化が予想される微視的なスケールにおいて，物理系の変化に不連続性の存在することが，争う余地なく明らかにされたのである．

II．光の量子すなわち光子

最初の一連の実験的事実は，マクスウェル＝ローレンツの輻射理論に根本的な訂正を求め，部分的には古い粒子説にもどることを余儀なくさせた．問題になるのは主として**光電効果**と**コンプトン効果**である．

§4. 光電効果

この方向の第一歩は，アインシュタインによるもので，光電効果に関する1905年の有名なノートのなかにある．プランクの理論に対する彼の一般的な態度は，《あたかも》輻射と黒体のあいだのエネルギーの交換が量子によって行なわれている《かのごとくすべては起こる》と述べ，この特別な仮説と波動論とを調和させようと努めることであった．この態度とは矛盾するが，吸収または放出の機構に不連続性を導入するに留まったプランクよりもっと先へ進んで，アインシュタインは光の輻射そのものが粒子，つまり光子の噴流で

あって，そのエネルギーは $h\nu$，その速さは c（真空中の光の速さ $=3\times10^{10}$ cm/s）であることを仮定した．そしてこの意外な仮説によれば，今まで解き明かされないままであったいくつかの現象がどのように説明されるかが示された．そのなかで特に重要なのが光電効果である．

光電効果と呼ばれるのは，真空中でアルカリ金属に紫外線を当てたときに観測される電子の放出である．生じる電流の強さは金属の受けた輻射の強さに比例する．他方，電子の速さは輻射の強さに関係がなく，その振動数だけで定まり（レーナルト，1902），光源からの距離がどうであっても同じである．毎秒放出される電子の個数だけが強さに比例し，したがって光源からの距離の二乗に逆比例する．

アインシュタインの説明はきわめて簡単である．光が放出されてから走った距離はどれほどであろうとも，それはエネルギー $h\nu$ の粒子群の形で振舞う．これらの光子の一つが金属の電子に出会ったとき，それは完全に吸収され，電子はエネルギー $h\nu$ を受け取る．金属から離れる際に，電子は，金属へ束縛エネルギー W に等しい仕事をしなければならない．それゆえ観測された電子は，はっきり決まったつぎの運動エネルギーをもつ：

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W. \tag{1}$$

この定量的な理論は実験によって完全に確かめられた．定数 W は，予想されたとおり，照射された金属に特有の定数であった．定数 h はどうかといえば，それは黒体輻射のスペクトルの式に現われるものとちょうど同じ数値をとった．

粒子論の成功に直面して，古典波動論もまた光電効果を説明できるかどうかを，検討しなければならなくなった．このことは先験的に想像もおよばぬことではない．実際，一つの光波がその強さに比例した一定量のエネルギーを運び，金属のなかへ侵入するにつれて，その全量または一部を譲ることはありうる．金属のなかにだんだん蓄えられたエネルギーが，たまたまいくつかの電子に集中すると，それらの電子が飛び出すに至る．何かまだ詳しくはわからない機構により，電子が $h\nu$ に等しい量のエネルギーを受け取るまでは，飛び出すことができないと想像することはできる．このタイプの説明が粒子論と本質的に違うのは，金属内へのエネルギーの蓄積が連続的な，漸増的な性格をもっている点である．その結果，光電放出は，瞬間的ではなく，金属がエネルギー $h\nu$ を受け取るまで起こらない．もし十分に細かい金属粒子を使えば，照射の始めと放出の始めとのあいだにある最小限のずれを，実験的に見いだせるくらい十分長くすることができるであろう．

これをねらった実験は，金属の粉を使ってマイヤーとゲルラッハ（1914）によってなされた．輻射の強さと粉の大きさはわかっていたから，一つの粉が，一つの電子を放出するのに必要なエネルギー $h\nu$ を吸収するための，最小の照射時間を定めることができ，彼ら

の実験の条件では，それは数秒であった．ところで，毎回彼らは照射の始めから電子の放出を観察した．それゆえ，光の波動論は，少なくとも古典的な形では，光電効果を説明することが全然できないと結論しなければならない．

§5. コンプトン効果

コンプトン効果は光子論のもう一つの証拠であり，波動論に不利益をもたらしたものである．それは自由な（または弱く束縛された）電子によるX線の散乱に見られる（コンプトン，1924）．散乱された輻射の波長は入射した輻射の波長より大きい．その差 $\Delta\lambda$ は，入射輻射の伝播の方向と，散乱光を観測する方向とのあいだの角 θ の関数であって，コンプトンの式

$$\Delta\lambda = 4\pi \frac{\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2} \tag{2}$$

にしたがって変わる．ここで m は電子の静止質量である(8)．$\Delta\lambda$ が入射波長によらないことに注意されたい．コンプトンとデバイは，コンプトン現象が入射光の光子と照射された目標の電子とのあいだの単なる弾性衝突であることを示した．

コンプトン効果に対するこの粒子的説明を細かく述べるために，アインシュタインの仮説から直接に出てくる光子の性質を，いくつか明らかにしておくのが便利である．それは速さ c をもつから，光子は質量0の粒子である(9)．それゆえ光子の運動量 p とエネルギー ε とは

$$\varepsilon = pc \tag{3}$$

という関係で結ばれている．

単色光の平面波

$$\exp\left\{2\pi i\left(\frac{\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{r}}{\lambda} - \nu t\right)\right\}$$

を考えよう．$\boldsymbol{u}$ は伝播方向の単位ベクトル，λ は波長，ν は振動数である：$\lambda\nu = c$．アインシュタインの仮説によると，この波はエネルギー $h\nu$ の光子の噴流である．この光子の運動量は明らかに $\boldsymbol{u}$ の向きをもち，その絶対値は，（3）により，

---

(8) 長さ $\hbar/mc$ は原子の平均半径と原子核の半径との中間にあって（$\hbar/mc = 3.86 \times 10^{-10}$ cm)，電子の量子理論である役割を演じる．それは電子のコンプトン波長と呼ばれる．

(9) 相対性理論によれば，一つの粒子の（静止）質量 m，エネルギー ε，運動量 p は $\varepsilon^2 - p^2c^2 = m^2c^4$ という関係で結ばれている．その速さは $v = \partial\varepsilon/\partial p = pc^2/\varepsilon$．もし $v = c$ ならば，$\varepsilon = pc$ で $m = 0$．

$$p=\frac{h\nu}{c}=\frac{h}{\lambda}$$

に等しい．

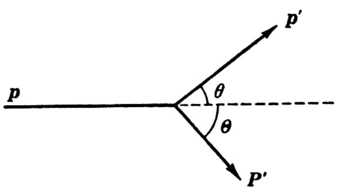
この関係式は，第2章で学ぶL.ド・ブロイの関係の特別な場合である．角振動数 $\omega=2\pi\nu$ と平面波の波数ベクトル $\boldsymbol{k}=(2\pi/\lambda)\boldsymbol{u}$ を導入するとつごうのよいことが多い．そのとき対応関係はつぎのように書かれる：

$$\varepsilon=\hbar\omega, \qquad \boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}. \tag{4}$$

こうしておいて，入射光子と電子との弾性衝突の際に，全エネルギーと全運動量が保存されることを書き下すと，コンプトン効果についての粒子論ができる．$\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'$ をそれぞれ光子の初めの運動量と終りの運動量とし，$\boldsymbol{P}'$ を衝突後の電子の反跳運動量とする(1・2図)．保存の方程式は

$$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{P}', \qquad mc^2+pc=\sqrt{P'^2c^2+m^2c^4}+p'c \tag{I}$$

と書かれる．



1・2 図 光子と静止した電子とのコンプトン衝突

初期条件と散乱光子の放出方向とを知れば，この方程式によって衝突は完全に決められる．対応関係（4）を考えに入れると，これからコンプトンの式は容易に導き出され，それがこの式の理論的な説明になっている（問題1を参照）．コンプトンによる最初の仕事のあと，この理論から予想されるその他の結果も，すべて実験的に確かめられた．反跳電子が観測され，そのエネルギーの変化を放出角 Θ の関数として表わす法則も，方程式（I）から導かれるものとちょうど同じであった．同時性を確かめるいくつかの実験によって，散乱光子と反跳電子の放出はまったく同時に起こり，放出角 θ と Θ との相互関係は理論に一致することが明らかにされた．

この結果を古典理論による予想と比較するのは有益なことである．マクスウェル＝ローレンツの理論は，入射電磁エネルギーの一部が照射を受けた一つ一つの電子に吸収され，同じ振動数の輻射の形でそれがもう一度放出されることを予想する．吸収された輻射の運動量とは逆に，放出された輻射の全運動量は0である．それゆえ，光の散乱の過程は，電磁輻射から照射された電子への運動量の連続的な移行（輻射圧）を伴い，電子は入射波の伝播方向に進む加速を受ける．吸収と放射の振動数が同じであるという法則は，電子に対して静止している座標系において成り立つものである．電子は動いているから，実験室の

座標系において観測された振動数は，ドップラー効果のためにちがってくる．波長のずれ $\Delta\lambda$ は，散乱輻射を観測する角 θ によって決まる．簡単な計算により

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{P_{\mathrm{cl.}}c}{E_{\mathrm{cl.}}-P_{\mathrm{cl.}}c} \sin^2\frac{\theta}{2} \tag{5}$$

となる．ここで λ は入射波長，$P_{\mathrm{cl.}}$ は電子の運動量（伝播の方向に動いているとする），$E_{\mathrm{cl.}}=\sqrt{m^2c^4+P_{\mathrm{cl.}}^2c^2}$ はそのエネルギーである．$\Delta\lambda$ は $P_{\mathrm{cl.}}$ の増加関数であって，照射をつづけるあいだ規則的に増大してゆく．

それゆえ，古典的予想は実験的事実と一致しない．コンプトン効果に関する古典理論の本質的な欠陥は，輻射の運動量とエネルギーが，照射にさらされるすべての電子へ連続的に移行すると予想する点にある．一方，実験的に観測された事実は，いくつかの電子への不連続的で瞬間的な移行である．これは光電効果の場合に出会ったのと同じ性質の困難である．この二つの効果はさらにある密接な関係をもっている．コンプトン散乱は光の吸収とその後の再放出と考えることができるが，光電効果は純粋で単純な吸収である．

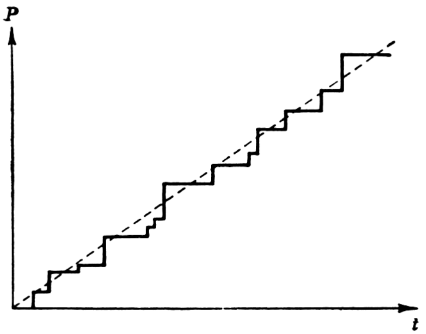
電子への運動量とエネルギーの移行の不連続な性格を考えに入れようとすれば，光の量子の導入を避けることはできない．それにもかかわらず，コンプトン効果に関する古典的な式（５）と正しい式（２）との類似は，古典理論が実際の現象とある関係をもっていることを暗示する．このことはもっと詳しく調べる価値がある．

ここまではコンプトン効果を計算するとき，電子が初めに静止していると仮定した．もちろん，理論は電子の初速が０でないときにも成り立つ．方程式（Ｉ）とコンプトンの式は容易に一般化される．特別な場合として，電子が入射光波と平行に運動量 P とエネルギー $E=\sqrt{m^2c^4+P^2c^2}$ をもって動いているときには，

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{(P+p)c}{E-Pc} \sin^2\frac{\theta}{2} \tag{6}$$

となる（問題１）．

ずれ $\Delta\lambda$ に関するこの式と古典的な式（５）とが非常によく似ていることに注意されたい．（５）から（６）へ移るためには，運動量 $P_{\mathrm{cl.}}$ を分子では $P+p$（光子－電子衝突のあとの運動量の大きさの程度）という量に，分母では（式 $E_{\mathrm{cl.}}-P_{\mathrm{cl.}}c$ のなかでは）衝突前の運動量 P に置き換えることが必要である．しかしながら，（６）が扱っている機構は古典的な機構と大変ちがっている．照射をつづけた結果として，各電子は１回目の運動量の移譲を受けて動き出し，それから第２回目，以下同様とつづけられる．移される運動量は，おおよそ入射光子の運動量 p に等しい平均値の近くで，各回の衝突ごとに違った値をとる．p 程度の大きさの不連続な量子による運動量の変化と，それに伴うずれ $\Delta\lambda$ の変化



1·3 図　一つの電子が単色光輻射にさらされたとき，つづいて起こる一連のコンプトン衝突による運動量Pの変化を，時刻の関数として表わしたもの（ここに掲げたのはこの現象の概念的な図である．この表現の限界については，第 4 章で不確定性関係に関連して調べるであろう）．点線は古典論から予想される $P_{cl.}(t)$ である．

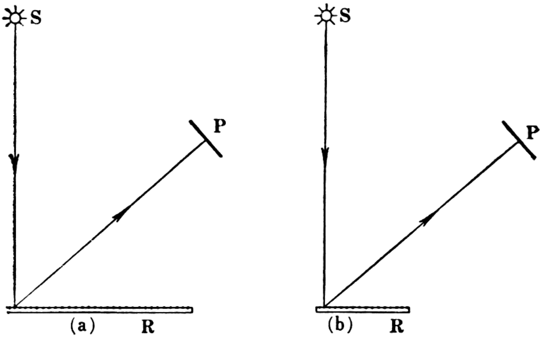
を，われわれは古典理論の予想する連続な変化と対照させてみよう(1·3図).

この種の比較に意味があるのは，量子が無限に小さく，また無限に数多くあると考えられ，非常に多くの衝突がひきつづいて起こるとき，その平均的結果を考察するような極限の場合に限る．電子は衝突により平均p程度の大きさの運動量を獲得し，きわめて多くの衝突のあとでは，平均からの偏りは互いに消しあうから，これらを合わせた結果は実際上，毎回の衝突でこの平均運動量を受け取ったのと同じになる．それゆえ，電子の運動量 P は不連続な変化を繰り返しながら，入射輻射の方向に増加する．この飛躍は量子 $p=h\nu/c$ の大きさ程度のものであり，量 p が無限小とみなされるような尺度では，運動量の増加は連続的な増加と同じように考えられる．この近似の極限において，平均運動量 $\langle P\rangle$ が定義され，それは時間の経過とともに連続的に増加する．注意深い実験的研究によると——それについてはここで詳しく立ち入らないが——この平均運動量の変化は時刻の関数として，古典論が予想するものと正確に同じであること，言いかえれば，ベクトル $\langle P\rangle$ と $P_{cl.}$ とはつねに等しくなることが示される．さらに，p とは関係なしに決まる古典的な値 $P_{cl.}$ は，各瞬間において P の平均値に等しいから，古典論の予想するコンプトンのずれ（式（5））は各瞬間において，実際に観測されるコンプトンのずれ（式（6））の平均値に等しい．

§6.　光量子と干渉の現象

古典波動論が巨視的には正しいという証拠がいくつかあるにしても，微視的なスケールでは，光電効果とコンプトン効果のような，それぞれ吸収と散乱に関する典型的な現象を説明できるのは，光の粒子論だけであることも明らかである．われわれには，光子仮説が，干渉と回折という本質的に波動的な現象とどのように結びつけられたかを調べることが残されている．

考えを固定するために，平行格子による単色光の束の散乱を取り上げよう (1·4 図)．適当なところにスクリーンを置けば，干渉像がはっきり示される．この現象の定量的な観測



1・4 図 格子による光の散乱：
S—光源，R—格子，P—乾板．(b)の場合，Rの右半分が除かれている．

はいろいろな方法で行なうことができる．たとえば，スクリーンを写真乾板にかえ，一定時間の照射ののちに，それを現像すればよい．干渉像は現像のとき陰画の形で現われ，乾板表面の各小部分の黒さは，受けた光の量に比例する．実際には，乾板による光の吸収は量子によって行なわれる．乾板に侵入した各光子は感光材の微細な結晶を刺激し，それは現像の際黒い斑点をつくる(10)． 肉眼で斑点を一つ一つ見分けることは不可能であり，実際に観察されるのは連続的な黒さの濃淡である．それは，衝突の密度が大きいか小さいかによって，濃くあるいは淡く現われる．しかし十分強力な顕微鏡で乾板を調べるならば，衝突がばらばらに存在することが実際に確かめられる．ふつうの条件で実験するときは，乾板が受ける光子の数は非常に多く，ほとんど連続的な衝突の分布は，波動論によって予想される干渉像をつくる．

さてここで，純粋な粒子論の枠のなかでなされるこの現象の説明は，実験的事実だけに基づいて，いずれも議論の余地なく退けることができる．まず，光子は一つ一つ独立に伝播すること，そしてそれらの相互作用はまったく無視できることに注意しよう．事実，光源の強さを減らし，それだけ照射時間を長くしても，格子が受ける光量を一定に保つならば，干渉像はもとのとおりである．言葉をかえると，格子にある個数 N (非常に大きい)の光子を送れば，入射光子がかたまっていってもそうでなくても，乾板上の衝突の分布は

(10) ここでは現象の叙述を極端に単純化しておく．実際には，光子のエネルギーが十分大きい場合（遠紫外線またはX線）でなければ，単独の光子の衝突が微細結晶を感光させるまでには至らない．このような場合でさえ，乾板の受けた各光子が，一つ，そしてただ一つの微細結晶を刺激したとほぼ確実に断言できるためには，いくつかの特別な実験上の条件が必要である（適当な大きさの微細結晶，十分に厚い乾板など）．しかしこれらはここで述べる議論の本質には影響がないから，これらの複雑な問題には立ち入らない．

同じであり，さらにこのことは，極限において光子が《一つ一つ格子に落ちる》ような非常に弱い光度の場合にも正しい．ただ一つの光子を格子に送る実験をN回繰り返すときにも，同じ分布が得られるであろう．

そこで格子による一つの光子の散乱という問題を調べよう．実験の条件の下では，この系（光子＋格子）の初期状態が厳密にはわからないから，光子の軌道を決定することは問題にならないし，まして散乱した光子の乾板上への衝突を決定することは論外であるが，ただ，可能な軌道の統計的分布と衝突の統計的分布だけは決められる．実験的には，衝突の統計的分布が実際に観察される．これは，一つの定数を除けば，乾板上に干渉像をつくる光の強さの分布法則である．さて，よく知られた現象であるが，格子の分解能はその縞目（等間隔としよう）の個数によって決まり，この個数が大きくなるとそれだけ光の縞の幅は狭くなる．それゆえ格子の半分を取り除けば，干渉像ははっきりと変わる．まさにこの点において，粒子論は実験と明白に矛盾する．実際，格子をつくっている粒子と相互作用する各光子の運動方程式がどんなものであろうと，格子の大きさ程度の大きさを光子に与えない限り，格子の左半分によって散乱される光子の軌道の分布は，右半分がある（1·4図a）とか，またはない（1·4 図b）とかいうことに無関係なはずである．さらに，光源と写真乾板が十分遠くにあれば，右半分と左半分によって散乱された光子の方向の分布は，いうまでもなく同じである．それゆえ，格子の右半分を除けば，乾板の各点が受ける光の強さは減少するが，干渉像の形は変わらないはずである．実験はこの予想と矛盾し，われわれは格子の全体が散乱の機構に関与していると認めないわけにはいかない．

干渉または回折を扱う場合，いつでも光粒子の仮説は同種の困難に出会う（問題２）．検出装置（スクリーンまたは写真乾板または他のもっと完全な装置のすべて）に光子が一つ一つ到達するのを実際にみつけることはできるが，各光子に正確な軌道を与えようとすると必ず矛盾に陥る．古典的原則によれば，粒子は空間のなかを時刻の関数として連続的に移動するはずであるから，この原則は誤っていることになる．検出装置に至るまでの途中では，光は波として伝播するかのようにすべてのことが起こり，検出の瞬間まで粒子の姿を現わさないのである．

§7. 結　　び

ここでわれわれは，微視的なスケールにおける物質と光の相互作用に関する実験結果から，いくつかの結論を今後のために引き出しておくことができる．

観測された不連続性が光の粒子像によってだけうまく説明されるとしても，波動の概念を捨て去ることは問題にならない．光は波動と粒子の二つの姿をとって生じるものであり，これらの姿はそれぞれ，考えている現象が何であるかにしたがって，より明瞭に，ま

たはより不明瞭に現われる．前の対応関係（4）によって一つの記述方法からもう一つの記述方法へ移ることができる．これら二つの方法を密接に結びつけるものは，格子による散乱の実験について論じたときに示されたように，統計的な結びつきである．光子がある点に位置を占める確率はこの点における光波の強さに等しく，その強さは波動光学の方法によって計算される．この波動-粒子二重性の存在は古典的原則と相容れない．実験的事実と矛盾に陥らないで，光を古典的な粒子の噴流とみなすことも，古典的な波の重ね合わせとみなすこともできない．

古典的原則を改めるという見通しに立って，古典波動論の結果のいくつかはやはり正しいという事実を強調することが特に重要である．まず第一に，運動量保存とエネルギー保存の法則は厳密に確かめられている．また，コンプトン効果に関連して見たように，量子的不連続性が無限小として取り扱われるような《巨視的な極限》では，古典理論は現象の平均的推移を正確に予想する．

III. 物質系における量子化

§8. 原子スペクトルとラザフォードの古典的な模型の難点

われわれは前節で，物質と輻射の相互作用の機構における不連続性の存在が，光の古典論にもたらした混乱を見てきた．しかし《つまずき》は光にとどまらず，物質についての古典的な粒子論をも同じように混乱させた．このことは，原子スペクトルについてのデータとラザフォードによって得られた原子構造に関する結果とを結びつけようとしたとき，はっきりと現われた(11)．

物質による光の放出と吸収のスペクトルの研究が完成するにつれて明らかにされた事実のうち，特に目立つものの一つは，細いスペクトル線の存在である．放出または吸収される輻射の振動数は，原子によって異なる．しかし，ある決まった原子の吸収スペクトルと放出のスペクトルは互いに区別がなく，一方の各スペクトル線は，適当な条件の下で操作すれば，他方においても観測される．各原子はこのスペクトルによって同定することができ，したがってスペクトルは，原子の構造および輻射との相互作用の機構に関する情報の

(11) 歴史的に言うと，物質系を《量子化する》必要を最初に示した議論は，アインシュタインにより，固体比熱の理論のなかでなされた(1907)．固体のように複雑な物質系を取り扱う際には避けられないことであるが，この理論はかなり粗い近似を含んでいる．また，この理論と密接な関係をもつ黒体の理論と同じように，この理論には統計熱力学のいくつかの結果が介入してくる．このようなわけで，ここでは詳しく述べることをやめるが，読者は前掲（4頁）の M. Born, *Atomic Physics* のような著書を参照されたい．

本質的な要素になっている．

水素はすべての原子のなかで最も簡単なもの（1陽子＋1電子）であるから，ここでその場合を特に述べる価値がある．観測された振動数はすべてバルマーの実験式

$$\nu = R\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right)$$

を満たす．ここで n と m は正の整数 ($m > n$) であり，R は水素に固有の定数（**リュードベリ定数**）である．

もっと複雑な原子の場合には，このように簡単な式はないけれども，観測されたいろいろの振動数のあいだには，つねにある相互関係が認められる．すなわち，二つの振動数が同じスペクトルに属するときには，それらの和または差をもった線がまたこのスペクトルに含まれるということがしばしば起こるのである．もっと正確には，各原子に対して一つの数表すなわちスペクトル項の表をつくり，スペクトルの各振動数がそのうちの二つの項の差に等しくなるように項の値を選ぶことができる．この規則は，バルマーの式もその特別な場合であるが，リュードベリ＝リッツの結合規則 (1905) と呼ばれる．詳しくいうと，こうしてつくられた差は必ずしもすべてスペクトルの振動数にはならない．しかし比較的簡単な選択規則をつくることができて，それによると，これらの差のうちのどれがスペクトルに現われ，どれが現われないかを区別することができる．

これらの実験的事実は，ラザフォードによる原子輻射の古典理論とは明白に矛盾する．実は，ラザフォードの模型そのものも，クーロンの相互作用に限定するのをやめ，ローレンツの電子論にしたがって原子内電子と電磁場との相互作用を厳密に考慮に入れると，深刻な矛盾に出会うのである．実際，電子は軌道を描きながら輻射を放出してエネルギーをしだいに失い，しまいには核の上に落ち込む．各瞬間に放出される輻射について観測される振動数は，軌道上における電子の運動の振動数か，またはその倍数に等しい．この運動の振動数は変速とともに変わるから，連続スペクトルをもつ光の放出が起こる．それゆえ，ラザフォードの古典原子論では，原子の安定性も，線状スペクトルの存在も説明できない．われわれの前には，物質と光の相互作用における不連続性が，もう一つ新たに現われた．ここでも古典論は連続的な変化を予想しているのである．

§9. 原子のエネルギー準位の量子化

1913年にボーアは，古典的概念とは両立しない要請，すなわち，原子のエネルギー準位の量子化の要請によって，光量子の仮説を補い，スペクトルを説明する一般的な方式を得た．

ボーアによれば，原子は，連続的な形でエネルギーを交換できる古典的な系のようには

振舞わない．それはいくつかの**定常状態**，つまりそれぞれはっきり決まったエネルギーをもつ量子的状態でだけ存在できる．これをわれわれは，原子のエネルギーが量子化されたという．エネルギーは飛躍を繰り返して変化するだけであり，おのおのの飛躍は，一つの状態からもう一つの状態への遷移に相当する．

この要請によって，量子による光の吸収あるいは放出の機構を明確にすることができる．光の輻射があるとき，エネルギー E_i の原子は一つの光子 $h\nu$ を吸収することによって，もっと高いエネルギー $E_j(>E_i)$ の状態へ遷移を行なうことができるが，その際全エネルギーは保存されなければならない．すなわち

$$h\nu=E_j-E_i.$$

同じように，一つの光子 $h\nu$ を放出することによって，もっと低いエネルギー $E_k(<E_i)$ の状態に遷移を行なうこともできるが，その際光子の振動数は関係

$$h\nu=E_i-E_k$$

を満たす．もしも原子が最も低いエネルギーの状態（基底状態）にあるならば，輻射を出すことはできず，安定したままである．

こうして各原子に特有の，リュードベリ＝リッツの結合規則を満たすスペクトル線の存在が説明された．この規則によると，スペクトル項は，因数 h を除けば，原子の量子状態のエネルギーに等しい．特に水素原子の場合には，エネルギー準位が式

$$E_n=-h\frac{R}{n^2}\qquad(n=1,2,\cdots,\infty)\tag{7}$$

で与えられると考えれば，ふたたびバルマーの式を得る．

原子のエネルギー準位の量子化の証拠はもう一つ，電子と原子との非弾性衝突についてフランクとヘルツが行なった実験によって与えられた (1914)．この実験は，一定の運動エネルギーをもった電子を原子に衝突させ，散乱した電子の運動エネルギーを測定するものである．これから，差をとると，衝突の際原子に吸収されたエネルギーの量を出すことができる．$E_0, E_1, E_2, \cdots$ を原子の量子化されたエネルギー準位の列とし，T を入射電子の運動エネルギーとする．実験の条件の下では，目標の原子はすべて実際上基底状態にある．T が基底エネルギーと最初の励起状態のエネルギーとの差 E_1-E_0 より小さいあいだは，原子はエネルギーを吸収できず，衝突はすべて弾性的である．$T>E_1-E_0$ になるとすぐに非弾性衝突が起こりえて，その際電子は E_1-E_0 に等しい量のエネルギーを失い，原子は最初の励起状態に移る．このことがぴったりと実験的に確かめられた．同じようにして，$T>E_2-E_0$ になるとすぐ第二の励起状態への励起を伴う衝突が観測され，以下同様である．

それゆえ，原子のエネルギー準位の量子化は，実験的事実と考えなければならない．こ

の性質は原子に特有なものではない．実験の進歩，特にスペクトル分析の分野における進歩によって，分子の場合にも，もっと複雑な粒子系の場合にも，やはりこの性質が見いだされた．こうしてわれわれは，きわめて一般的な，古典的粒子論では説明できないような物質の性質に直面したのである．

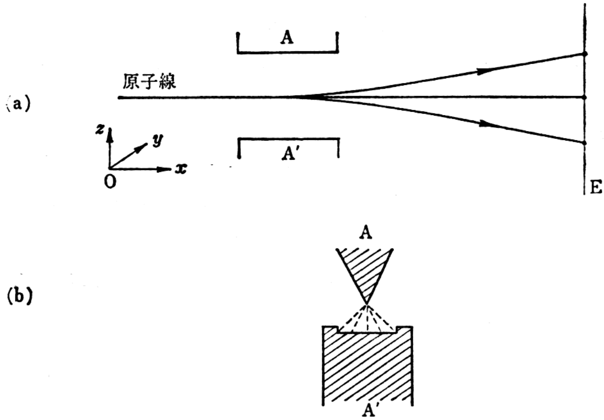
§10. 他の量子化の例：方向量子化

実験的に観測されたもう一つの型の量子化は，向きの量子化すなわち原子系の《方向量子化》という型である．外部の場のなかに置かれた原子が，特に選ばれた方向をとることはしばしば観測される．原子系の向きは任意ではなく，あるとびとびの値に限られる．

この型の量子化の最も直接な証拠は，一様でない磁場内における常磁性原子（または分子）の噴流の偏りに関する**シュテルン＝ゲルラッハの実験**（1922）によって与えられた．常磁性原子には仮定により永久磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ が与えられており，$\boldsymbol{\mu}$ に比例する角運動量 $\boldsymbol{l}$ をもつ小さなコマのように考えられる．

$$\boldsymbol{\mu} = M\boldsymbol{l}.$$

$\boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{l}$ の向きは原子自身の向きを定める．磁場 $\mathcal{H}$ のなかでは，この角運動量が $\mathcal{H}$ のまわりに歳差運動を行なう（ラーモアの歳差運動，問題3を参照）．もし $\mathcal{H}$ が一定ならば，磁気エネルギー $-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathcal{H}$ は一定で原子の重心の位置には関係がなく，重心は一様な直線運動を行なう．もし $\mathcal{H}$ が一様でなければ，原子の重心は力 $\boldsymbol{F} = \mathrm{grad}(\boldsymbol{\mu}\cdot\mathcal{H})$ を受け，いくらかの偏りを生じる．これがシュテルン＝ゲルラッハの実験で観測されたもので，実験の方式は1･5図に示す．$\boldsymbol{\mu}$ は場 $\mathcal{H}$ のまわりに歳差運動をするのだから，場の方向の $\boldsymbol{\mu}$ の成分 μ_z は一定のままであるが，他の成分は0の近くを振動する．原子が受ける力をそれが何度も振動するあいだにわたって平均すると $\mu_z \,\mathrm{grad}\,\mathcal{H}_z$ になるが，原子の軌道運動はあたかも原子がこの平均の力を受けているかのように起こる．ふつうの実験環境では，この平均の力は Oz の方を向いており，$\mu_z(\partial\mathcal{H}_z/\partial z)$ に等しい．原子が電磁場内を走る距離を $2l$，入射噴流の原子の運動エネルギーを T とする．簡単な計算によって，各原子の速度は，最初の方向 Ox から角 $\simeq \mu_z(\partial\mathcal{H}_z/\partial z)(l/T)$ だけ偏ることがわかる．したがって偏りは，場の方向への $\boldsymbol{\mu}$ の成分に比例する．もしこれらの原子がまったく勝手な向きを与えられているとすれば，μ_z は $-\mu$ と $+\mu$ のあいだにあるすべての値をとり，偏りの角も対応する両端の値のあいだにあるすべての値をとりうるであろう．スクリーン上に衝突した原子は，Oz の方向に伸びた長い一つの痕跡をつくるはずである．ところが実際に観測されたのは小さな痕跡の列であり，それは等間隔で Oz に平行に並んでいる．場を（したがって $(\partial\mathcal{H}_z/\partial z)$ を）変えると，それに応じて痕跡相互の距離が変わり，



1·5 図 シュテルン＝ゲルラッハの実験
(a) 実験の概要：原子線は磁極片 AA' のあいだを通り，そこには一様でない磁場（図では上下の方向に向いている）ができている．原子の衝突はスクリーン E の上で観測される．
(b) 磁極片の断面：点線は磁力線．

その他には形に変化がない．特に痕跡の個数 λ は一定のままである．各痕跡は μ_z の決まった値に対応する．それゆえ，μ_z は λ 個の異なる値をとりうる量子化された量であることがわかる．角運動量の成分 l_z も明らかに同じ性質をもつ．

シュテルンとゲルラッハの実験に対するこのような解釈に対して，それは原子の常磁性の原因と，角運動量に比例する永久磁気モーメントの存在とに関する非常に奇妙な仮説に基づいている，という非難がありうる．ここでは，このような仮説を正当化する事実と議論（磁気回転効果，常磁性帯磁率に関するランジュヴァンの理論など）にまで話をひろげないことにしよう．それは，量子力学のその後の発展によって十分に確かめられたことである．上に与えた説明の細かい点に疑問をもつ人があっても，内部運動を規定するなんらかの量が量子化されていることを認めないでは，スクリーンの上の λ 個の異なる痕跡の存在をどうして説明したらよいか，ほとんどわからないであろう．なぜなら，重心の運動が古典力学の法則にしたがう限り，その軌道は，磁場への入口における原子の力学的な状態によって完全に決められる．スクリーンの上に多かれ少なかれひろがりをもった衝突の分布が現われることは，すべての原子が同じ初期条件にはないという事実と，初期状態を定める力学変数が多少ともひろがりをもったある範囲に，統計的に分布しているという事実を示している．λ 個の異なる痕跡の存在は，この統計的分布が少なくとも λ 個の不連続性を示すこと，言いかえれば，原子のある力学変数が量子化されていることを証明している．原子は実際上すべて基底状態にある（そうでなければ輻射を行なうであろう）から，

ここでエネルギーの量子化は問題にならない．そして，スクリーン上に観測された効果は方向性のものであるから，量子化されていることがこのように明らかとなった原子の力学変数は，原子の向きに関係している．

シュテルンとゲルラッハの実験以外にも，方向量子化のもっと間接的な証明は，まだ十分に存在する．特に取りあげたいのは，定常磁場がスペクトル構造に及ぼす効果すなわち**ゼーマン効果**（1896）であり，これについてはたちもどる機会があるであろう．これらの現象はすべて共通の原因をもっており，それは角運動量の量子化である．量子力学のその後の発展は，このことを明瞭に示した．

IV. 対応原理と前期量子論

§11. 古典的な粒子論は不十分であること

いくつかの物理量の量子化は――この点を十分に強調する必要があるのだが――物質についての古典的粒子論と両立しない実験事実である．古典的粒子系のエネルギーは本質的に連続な量であって，力の法則を何かある方法で修正してもいくつかの補助的な力学変数を導入してさえも，この性質を変えることはまったくできないようなものである．したがって，粒子系のエネルギーが許されたとびとびの値の列に制限されるという事実は，古典力学の枠からはみ出た結果である．同じ注意は，量子化された他の量のどれにもあてはめられる．

これと関連して，量子化された量の時間的変化は，厳密に古典的な用語では述べることができない．一つの原子を例にとり，それが初めには第1励起状態 E_1 にあるが，光子を放出して基底状態にふたたび落ちるとしよう．もしも，古典物理学の言葉を使って，原子のエネルギーの時間的変化を明確に言おうとすれば，エネルギーがある瞬間に E_1 から E_0 への不連続的な飛躍をすることを認めなければならない．この二つの値のあいだの，エネルギーの連続的な変化は，すべて禁止されているからである．しかし正確にいつこの飛躍が起こるかを予言することは不可能である．なぜなら，もしも飛躍に先立つ全時間を通じて，原子の力学的状態がずっと同一のままであるとすれば，飛躍がある決まった瞬間に起こり，他の瞬間には起こらないという理由はない．せいぜい単位時間に飛躍が起こる確率について言えるだけである．事実，古典物理学によってこの状況を記述することは不可能であり，ある正確な一瞬に飛躍が起こるというイメージそのものが，まったく正しくないのである．時刻の関数としての，エネルギーの精密な変化を心に描くことは断念しなければならない．定義できるただ一つのこと，それは初めの瞬間に励起状態にあった原子が，

その後のある決まった瞬間に基底状態にある確率である．あとで学ぶように，励起を失う確率は――放射性核の崩壊の法則と同じように――減少の指数法則にしたがい，その定数は単位時間に励起を失う確率，あるいは同じことであるが，励起状態の半減期の逆数に等しい．

したがってわれわれは，古典的な概念をいくつか捨てる代りに，この量子化現象を物質に関する一貫した理論にまとめ，そこから，量子化された量の精密な数値と，起こりうるいろいろな量子的推移に関連する量――たとえば先に取りあげた原子の励起状態の半減期のようなもの――の精密な数値を導き出せるようにしなければならない．この計画が初めて十分に実現したのは，近代的な形の量子力学が建設されたときである．それよりさき，ボーアとその学派（クラーマース，ゾンマーフェルト）は量子論の最初の下書きをつくり，それによって特に水素型原子のスペクトル項を正確に予想することができた．この前期量子論にはいくつかの原理上の難点といくつかの制限があるけれども，その大筋を知ることは，この理論のその後の発展をよく理解するのに有益である．またこれは，量子力学の建設の際，本質的な役割を果たした一つの発見的原理，すなわち対応原理の最初の適用例でもある．これから前期量子論を紹介する際，われわれが特に注意を払うのはこの点である．この理論を補ったのは，物質と輻射の相互作用に関する半古典理論であって，これもまた対応原理に基づいているが，この本ではそれに触れないことにする(12)．

§12. 対応原理

対応原理がボーアによってはじめて明確に定式化されたのは1923年(13) であるが，それまでの彼の仕事もすべて着想をここから得ていたのである．それは，正しい理論をつくり上げ解釈する際に，古典力学の概念と結果が，手引きとしてどの範囲まで役に立ちうるかを，明確にすることにある．

われわれはすでに，光の量子に関連して，輻射に関する古典理論が成り立つ範囲について論じた．そこで述べたことは古典理論に対して一般にあてはまる．それは，巨視的なスケールからいくつかの微視的なスケールの現象を含むところまで，非常に広い範囲の現象を正しく予想する．微視的なスケールの現象のうちでは，静電磁場内の電子の運動，気体の原子または分子の熱運動などをあげておこう．微視的なスケールの現象を説明する際に古典理論のもつ難点の多くは，このスケールでは不連続性が現われることに由来する．

そこで古典理論が《巨視的には正しい》こと，言いかえると，それは量子的不連続が無

(12) L. DE BROGLIE, *Le principe de correspondance et les interactions entre matière et rayonnement*, Actualités Scientifiques et Industrielles, Hermann, 1938.

(13) N. BOHR, *Zeitsch. f. Phys.*, **13** (1923), 117.

限に小さいものとして扱われるような極限において諸現象を説明するものであることを，既定の事実のように考えることができる．この極限の場合には，厳密な理論の予想が，いつも古典理論の予想と一致しなければならない．これが，量子論に課せられ，それを強く制限する条件である．これを簡潔に表現するため，しばしばつぎのように言われる：量子論は量子数が大きくなる極限において，古典理論に漸近的に収束しなければならない．

この条件が満たされるために，量子論と古典理論のあいだには形式的な類似が存在するということを原理として認める．二つの理論のあいだにあるこの《対応》は，最も微細な点にまで効力をもち，新理論の結果を解釈するとき，手引きの役をするはずのものである．

§13. リュードベリ定数の計算への対応原理の適用

水素原子のエネルギー準位を量子数nの関数として表わした式（7）が対応原理と相容れることを確かめ，この原理を適用することにより，この式のなかに現われる定数Rの数値が明瞭に定められることを示そう．

ラザフォードの古典理論によれば，水素原子は一つの電子と一つの陽子から成り，それらはクーロンの相互作用を受ける（ポテンシャルは $-(e^2/r)$）．ケプラーの法則にしたがって——読者はこの法則を知っているものと仮定する——電子は陽子のまわりに楕円軌道を描き，その楕円の焦点に（無限に重いと仮定した）陽子がある．一つ一つの軌道に対応して，この軌道上の電子の運動のエネルギーの値 $E(<0)$ と振動数 $\nu_{\mathrm{cl.}}$ が定まる．これらの量は実際には楕円の長軸の長さだけで決まる．それらは互いにつぎの関係によって結ばれている．

$$\nu_{\mathrm{cl.}}(E)=\frac{1}{\pi e^2}\left(\frac{2\,|E|^3}{m}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{8}$$

ここでmは電子の質量である．

この運動の過程で，電子はある輻射を放出するが，それは振動数が $\nu_{\mathrm{cl.}}$ またはその倍数の一つに等しい単色光の波の重ね合わせであり，楕円軌道の離心率が大きくなるほど，倍数の高い部分が多くなる．この輻射は連続的に放出され，それに伴ってエネルギーEは連続的に減少する．

これを，ボーアの理論が予想するような，とびとびの飛躍によるエネルギーの低下と比較しなければならない．nが非常に大きいときは，準位 E_n とそれにごく近い準位とのへだたりは，$\mathrm{d}E/\mathrm{d}n=2Rh/n^3$ のある整数倍になる．量子数の相対変化 $\Delta n/n$ がきわめて小さいときの光学的遷移に対してはいつでも，放出される振動数は，古典理論の場合と同じように，ある基本振動数

$$\nu_{\text{qu.}} \simeq 2\frac{R}{n^3} = 2\left(\frac{|E_n|^3}{Rh^3}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{9}$$

の倍振動（次数は $\Delta n-1$）である．n が非常に大きくなった極限において，エネルギー E_n は平均的に，小さな多数の量子的飛躍を繰り返しながら低下し，放出される振動数のスペクトル（もっと正確に言えば，このスペクトルのなかで，最も小さいエネルギー量子に対応する低い振動数の部分）は，対応原理によって，古典スペクトルと同じでなければならない．言いかえれば，

$$\nu_{\text{qu.}} \underset{n\to\infty}{\sim} \nu_{\text{cl.}}(E). \tag{10}$$

（8）と（9）を調べると，

$$R = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3} \tag{11}$$

と置くとき，この条件が実際に満たされることがわかる．Rの実験値は非常な精度（$\simeq 10^{-6}$）でわかっている．理論値（11）はこれと，10^{-4} 以下を除いて一致する[14]．ここにボーアの理論の最もめざましい成功の一つがある．

この理論は容易に，一つの電子と電荷 Ze をもつ一つの核から成る水素類似原子，特に一つイオン化されたヘリウム原子（$Z=2$）に拡張される．それにはすべての式において，e^2 を Ze^2 に置き換えればよい．こうして得られた He^+ のスペクトル項は，同じように 10^{-4} の驚くべき精度で，実験的に得られたものと一致する．

§14. 古典力学の方程式のラグランジュとハミルトンの形式

これからのち，量子論と古典理論の形式的対応について議論することを考え，古典解析力学のいくつかの事項を思い出しておくのがよい．

まったく一般に，古典系の力学的状態は，その位置――これは座標 $q_1, q_2, \cdots, q_R$ で定められる――と，その速度――これは時間に対する座標の変化率 $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_R$ で定められる――によって決まる．R はこの系の自由度である[15]．n 粒子系を考えるときには，位置の座標としてこれらの粒子の $3n$ 個のデカルト座標を選ぶことができるが，以下の考察は，

---

[14] Rを決めるのにこれだけの精度を期待するためには，陽子の質量Mが有限であることを考慮に入れる必要がある．それには，(11)において質量 m を換算質量 $m' = mM/(m+M)$ に置き換えればよい．この修正（$\simeq 5\times 10^{-4}$）を考えに入れても，R の理論値は実験値よりわずかに小さい．この差は本質的に相対論的効果によるに違いない．この効果は，実際には質量のわずかな増加として表わされる．

[15] ここでは束縛のない系だけを考える．言いかえると，q は一つ一つ独立に，何の制限もなく動くことができる．

他の座標を選んでもまったく同様に適用される．系の位置は各瞬間において，配置空間（位置座標空間）という R 次元空間のなかで，座標 $q_1, q_2, \cdots, q_R$ をもつ点Mによって表わされる．古典力学の目標は，時刻の関数として，この系の変化の法則を定式化すること，あるいは，その方がつごうがよいなら，配置空間において系の位置を表わす点Mの運動法則を定式化することである．

非常に多くの力学系——ここで考察しなければならないのはそれだけである——に対しては，この系を特徴づけるようなある一つの関数，すなわちラグランジュ関数

$$L \equiv L(q_1, q_2, \cdots, q_R; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_R; t)$$

を導入することによって，運動法則を書くことができる．

座標 q は R 個の2階微分方程式（ラグランジュの方程式）：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0 \qquad (r = 1, 2, \cdots, R)$$

を満たす．

この方程式に現われる量

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \qquad (r = 1, 2, \cdots, R)$$

はラグランジュの共役運動量と呼ばれる．q_r が質量 m の一つの粒子のデカルト座標の一つである場合，力が静的ポテンシャルから導かれるときには，p_r は q_r に対応するこの粒子の運動量の成分である：$p_r = m\dot{q}_r$.

運動の法則は，変分原理の形によっても同様に表わすことができる．実際，ラグランジュの方程式系は，最小作用の原理（モーペルテュイ＝ハミルトン）：

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L\,\mathrm{d}t = 0, \qquad \delta\mathrm{M}(t_1) = \delta\mathrm{M}(t_2) = 0 \tag{12}$$

に同値である．この式の意味はつぎの通りである：この系が時刻 t_1 における位置 M_1 から時刻 t_2 における位置 M_2 に移ることを許すようなすべての曲線 $\mathrm{M}(t)$ のうちで，実際に起こる運動の法則は，積分 $\int_{t_1}^{t_2} L\,\mathrm{d}t$ に停留値をとらせるものである．

古典力学の法則を表わすもう一つの特に有用な形式は，ハミルトンの正準形である．与えられた時刻における古典系の力学的状態は，R 個の位置座標 $q_1, q_2, \cdots, q_R$ と，これに対応する R 個の共役運動量 $p_1, p_2, \cdots, p_R$ を与えることによって完全に決まることに注意しよう．$q_1, \cdots, q_R$, $p_1, \cdots, p_R$ を座標とする $2R$ 次元の空間——位相空間という——を導入し，このような力学的状態を，この空間内に座標 q と p をもつ点Pによって表わすとつごうがよい．こうしておいて，ハミルトン関数

$$H \equiv H(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R; t) = \sum_{r=1}^{R} \dot{q}_r \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - L \qquad (13)$$

を定義しよう．運動の方程式は正準形

$$\dot{q}_r = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \qquad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial q_r} \qquad (r = 1, 2, \cdots, R) \qquad (14)$$

の形をとる．これは１階の微分方程式である．初めの瞬間の座標と運動量とを与えると，それ以後の各瞬間におけるそれらの値は完全に決まる．それゆえ，Hが時刻によらない場合には，位相空間の各点を，この系に許される運動を表わす軌道が，一つそしてただ一つだけ通る．

最も普通の場合には，Lは運動エネルギーTと位置エネルギーVの差で，Tは$\dot{q}$の同次２次関数である．$H = T + V$ は，この系の全エネルギーをqとpの関数として表わしたものである．しかしラグランジュとハミルトンの方式は，もっと一般な力学系にも適用される（問題４を参照）．言葉の意味をひろげて，すべての場合にHを全エネルギーとみなすことになっている．ハミルトンの方程式から $\dot{H} \equiv (\mathrm{d}H/\mathrm{d}t) = (\partial H/\partial t)$ が導かれる．言いかえると，ハミルトン関数が直接には時刻によらないならば，この系の全エネルギーは運動の定数である．このような系は保存的であるといわれる．

これらをすべて説明するために，(無限に重いと仮定した)陽子のクーロン場にある電子を考える．陽子を原点とするデカルト座標系において，$\boldsymbol{r}(x, y, z)$ をその位置，$\boldsymbol{v} = \mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t$ をその速度，$\boldsymbol{p}(p_x, p_y, p_z)$ をその運動量とする．ラグランジュ関数は

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{e^2}{r}$$

である．座標に共役な運動量はそれに対応する運動量の成分である（$p_x = \partial L/\partial v_x, p_y = \partial L/\partial v_y,\ p_z = \partial L/\partial v_z$）．ハミルトン関数の具体的な形

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

から，ハミルトンの方程式

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}, \qquad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \mathrm{grad}\frac{e^2}{r} = -e^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}$$

が導かれる．

この方程式からただちに，角運動量 $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ は運動の定数であることが確かめられる：$\mathrm{d}\boldsymbol{l}/\mathrm{d}t = 0$. これはポテンシャル $-e^2/r$ が中心対称性をもつということ（力が中心力）の結果である．また，電子の軌道が，原点を通りこの定ベクトル$\boldsymbol{l}$に垂直な平面に完全に含

まれていることも確かめられる．

他のどんな座標系を使っても，運動方程式は同じようにして得られる．xy 平面に含まれる軌道（$z=\dot{z}=0$）に対しては，極座標（r, φ）でつぎのようになる．

$$x=r\cos\varphi,\quad y=r\sin\varphi,\quad L=\frac{m}{2}(\dot{r}^2+(r\dot{\varphi})^2)+\frac{e^2}{r},$$

$$p_r=m\dot{r},\quad p_\varphi=mr^2\dot{\varphi},\quad H=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\varphi^2}{r^2}\right)-\frac{e^2}{r}.$$

これからハミルトンの方程式：

$$\dot{p}_\varphi=0,\quad \dot{\varphi}=\frac{p_\varphi}{mr^2},\quad \dot{p}_r=\frac{p_\varphi^2}{mr^3}-\frac{e^2}{r^2},\quad \dot{r}=\frac{p_r}{m} \tag{15}$$

を得る．p_φ は角運動量の大きさであるが，これは確かに運動の定数である．

§15. ボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則

本質的に前期量子論は，ボーアの仮説と対応原理とに基づいて，量子化された量を計算する一般的な方法である．その手続きはつぎのとおりである．物質粒子の系は古典力学の法則にしたがうものとする．また，運動方程式のすべての解のうち，いくつかの特別な量子化の規則を満たすものだけを残さなければならないことが要請される．こうして，ばらばらな一群の運動が選ばれる．仮定により，これらだけが実際に生じる運動である．これらの運動の一つ一つに，あるエネルギーの値が対応する．こうして得られたエネルギーの値の不連続な系列が，量子化されたエネルギー準位のスペクトルである．同様にして，他のすべての運動の定数に対し，許される値の離散（とびとびの）スペクトルが得られる．

《量子化の規則》をどう決めるかが，この前期量子論の中心問題をなしている．それは何よりもまず直観に依存することがらである．あるいくつかの規則を仮定してみて，それから生じる量子化された量のスペクトルを，実験結果と比較するのである．この探求にあたって，対応原理が貴重な手引きとなっている．

この原理によりまったく自然な形で結果に到達することのできるきわめて簡単な場合がある．古典的運動が周期運動であって，その振動数がエネルギーだけの関数

$$\nu_{\mathrm{cl.}}=\nu_{\mathrm{cl.}}(E)$$

になる場合である．これは特に水素原子において起こることである（(8）を参照）．E_1, $E_2, \cdots, E_n, \cdots$を，量子化されたエネルギーの列としよう．いつでも，この系のエネルギーは量子数 n の連続関数 $E(n)$ であって，エネルギーの量子化は，n が整数値だけをとりうるということから生じると考えてよい．リュードベリ定数を計算するために §13 でした推論を繰り返すことにより，われわれは古典的振動と量子的振動との対応関係

$$\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}n} \underset{n\to\infty}{\sim} \nu_{\mathrm{cl.}}(E)$$

を得る（(10) を参照）. これから，整数 n の大きな値に対して成り立つ量子化規則

$$\int^{E} \frac{\mathrm{d}E}{\nu_{\mathrm{cl.}}(E)} = nh + \text{定数}$$

が導かれる. この規則を n のすべての値に拡張し，

$$\int_{E_{\min}}^{E} \frac{\mathrm{d}E}{\nu_{\mathrm{cl.}}(E)} = nh \qquad (n = 1, 2, \cdots, \infty) \tag{16}$$

と置くのは自然である（$E_{\min}$ は古典系のエネルギーの最小値）. 水素原子の場合には，この量子化規則によって，ふたたびバルマーの式の項が正確に与えられる.

この規則は，自由度がただ一つの周期的な系にも同様にあてはめられる. この場合には，規則を一般化するのにもっとつごうのよい形にすることができる. q をこのような系の位置座標，p をそれに共役な運動量，$H(q, p) = E$ を全エネルギーとしよう. 位相空間は 2 次元で，周期運動はこの空間の閉曲線 $H(q, p) = \mathrm{const}$ によって表わされる(16). ハミルトンの方程式を用いると，

$$\int_{E_{\min}}^{E} \frac{\mathrm{d}E}{\nu_{\mathrm{cl.}}(E)} = \oint_{H=E} p\,\mathrm{d}q$$

となることを示すことができる. ここで，記号 $\oint_{H=E}$ は，エネルギー E に対応する運動の完全な 1 周期に対して積分が計算されなければならないことを意味する〔積分 $\oint p\,\mathrm{d}q$ は作用積分と呼ばれる〕. こうして規則 (16) と同値な量子化規則：

$$\oint p\,\mathrm{d}q = nh \qquad (n = 1, 2, \cdots, \infty) \tag{17}$$

が得られる. これによって，位相空間内の許された軌道と，それに対応する量子化エネルギーが定まる. この規則は，**ボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則**という名で知られている.

ウィルソンとゾンマーフェルトはこの規則を多重周期系に拡張した. これはいくつかの自由度をもつ系で，その運動は，座標 $q_1, q_2, \cdots, q_R$ とそれらに共役な運動量 $p_1, p_2, \cdots, p_R$ を適当に選ぶことにより，関数列 $p_1(q_1), p_2(q_2), \cdots, p_R(q_R)$ によって表わされるものである. 言いかえると，位相空間内の軌道は，各運動量 p_r が座標 q_r だけの関数であってその他のすべての変数によらないような軌道である. 関数 $p_r(q_r)$ はおのおの振動数 ν_r

(16) q が循環的な変数（たとえば角変数）であるとき，言いかえれば，ある周期 Q の整数倍だけ違う q の値が，この系の同じ配置を表わすときには，周期運動は位相空間のなかで，閉曲線ではなく，周期 Q をもつ曲線で表わされる.

の周期運動を表わす．系の運動は，それぞれ振動数 $\nu_1, \nu_2, \cdots, \nu_R$ をもつ周期運動の結合からできている．この場合，量子化の規則は R 個の関係

$$\oint p_r \mathrm{d}q_r = n_r h \qquad (r = 1, 2, \cdots, R) \tag{18}$$

である．R 個の量子数（整数）$n_1, n_2, \cdots, n_R$ は，この系の量子化された軌道と，エネルギー，角運動量などのようないろいろの運動の定数の量子化された値を定める．特にエネルギー $E(n_1, n_2, \cdots, n_R)$ を変数 $n_1, n_2, \cdots, n_R$ の関数と考えると，対応条件

$$\frac{\partial E}{\partial n_r} \underset{n_r\to\infty}{\sim} h\nu_r \qquad (r = 1, 2, \cdots, R)$$

を満たす．

例として水素原子の量子化を簡単に考察しよう．電子軌道の平面を一たび選んだあとでは2次元の問題であり，その極座標での方程式はすでに書いたとおりである（式 (15)）．角運動量の大きさとエネルギーとは運動の定数である．これら二つの量の値をそれぞれ $L(\geqslant 0)$ と $E(<0)$ に定めると，古典運動の可能な軌道が得られる．それは離心率

$$\sqrt{1+\frac{2L^2E}{me^4}}$$

の楕円である．

運動量 p_φ と p_r はそれぞれその共役座標の関数である．実際に

$$p_\varphi = L, \qquad \frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{L^2}{r^2}\right)-\frac{e^2}{r} = E.$$

したがってボーア＝ゾンマーフェルトの量子化の規則をあてはめることができる：

$$\oint p_\varphi \mathrm{d}\varphi = lh, \qquad \oint p_r \mathrm{d}r = kh.$$

ここで，l すなわち方位量子数と k すなわち動径量子数は正の整数（または 0）である．第一の規則は角運動量の量子化された値

$$L = l\hbar$$

を与える．第二の規則は，すこし長いがむずかしくはない計算によって，

$$\sqrt{\frac{2\pi^2 me^4}{(-E)}} - 2\pi L = kh$$

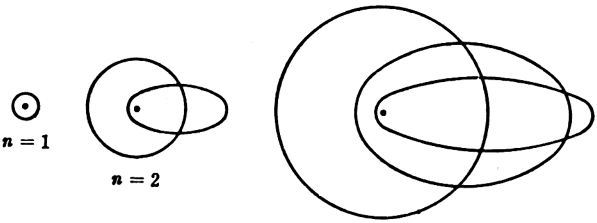
となる．これから，《主量子数》$n = l+k$ を導入すると，バルマーの式

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

が導かれ，リュードベリ定数の値はまえに計算したもの（式 (11)）と同じになる．

量子化エネルギーは，二つの量子数 l と k の和だけによって決まる．この性質はクーロ

ン・ポテンシャルに特有のもので，方位振動数と動径振動数が等しい ($\nu_\varphi = \nu_r$) という事実に基づく．エネルギー E_n には n 個の量子化された軌道が対応し，それぞれつぎのような l の値によって決まる：$l = 1, 2, \cdots, n$ ($l = 0$ という値は除かれるが，その理由をここでは論じない)．これらは離心率 $\sqrt{1-(l^2/n^2)}$ の楕円である．$l = n$ という値は円軌道に対応する[17]．



1·6 図　水素原子の基底準位 ($n = 1$) と最初の二つの励起準位 ($n = 2, 3$) におけるボーアの軌道．軌道の相対的な大きさが考慮されている．

同じ量子化の規則を相対論的運動方程式に適用し，それにより，この水素原子の理論に対する相対論的な補正を定めることができる．こうしてリュードベリ定数の値が得られ，それは実験値といっそうよく合っている（注[14]を参照)．さらに，エネルギーの《縮退》がとける，つまりおのおのの n に対して，非常に近いけれどもすこしずつ異なる量子化エネルギーの値が n 個対応し，その一つ一つは，角運動量 $l\hbar$ の正確な値に対応する．実験によって，水素原子スペクトルのこの微細構造は実際に観測され，それはこの理論による予想と十分によく一致する．

ここで，方向量子化の問題を調べよう．上に述べたような，同じ一つの平面内の軌道を量子化するやり方では，特に選ばれた方向というものはなく，エネルギーとか角運動量の大きさ ($L = l\hbar$) のようなスカラー量に対してだけ量子化スペクトルが決められる．軸対称性をもつ系（たとえば一様な磁場内の原子）に対しては，非常に一般的な方向量子化の規則がある．この場合，全角運動量の，回転軸 Oz 方向の成分 L_z は運動の定数である．古典力学において示されるように，この成分はいつでも，軸 Oz のまわりで系全体の回転配置を定める角 φ に共役な運動量と考えられる．したがって

$$\oint L_z \mathrm{d}\varphi = mh \qquad (m \text{ は整数})$$

---

(17) 1913年にボーアは円軌道の量子化によって，バルマーの式を導き出すのに成功した．楕円軌道の量子化はゾンマーフェルトによる．彼は相対論的な場合に理論を拡張した（以下のところを見よ)．

であり，L_z は定数であるから

$$L_z = m\hbar. \tag{19}$$

角運動量の回転軸方向の成分は $\hbar$ の整数（正または負）倍である．量子数 m は**磁気量子数**と呼ばれる．

§16. 前期量子論の成果とその限界

前期量子論の説明をこれ以上長くつづけることはやめよう．これによって非常に多数の原子系や分子系のスペクトル項の正確な評価が得られ，スペクトルの知識に関して驚くべき進歩を遂げることができた．水素原子の取り扱いは容易に水素類似原子 (He^+, Li^{++}) やアルカリ原子に拡張された．またこの理論は，分子の振動と回転のスペクトルにも，原子のX線スペクトルにも，正常ゼーマン効果にも適用された．物質と輻射の相互作用についての半古典理論によって補われながら，この理論はまた，いろいろな選択規則や，起こりうるいろいろな量子的遷移の確率を与えた．どの場合にも，理論の予想は実験のデータと驚くほど一致した．例外的には，非常に小さい量子数に対してときどきある不一致が起こったが，これは量子化の規則になんらかの経験的な修正を加えることによって改められた（方位量子数の値 $l=0$ を捨てたことはその一例である）．

それにもかかわらず，これは不完全な理論である．ボーア＝ゾンマーフェルトの規則は周期系または多重周期系以外には適用できない．非周期的な運動を量子化する方法はまったく存在しない．だから，フランクとヘルツの実験のように基本的な実験の機構が全然説明されないままであった．ボーア＝ゾンマーフェルトの理論は標的原子の量子化されたエネルギー準位を与えるが，電子が実際にたどる軌道を示し，電子と原子標的のあいだの非弾性衝突を詳しく述べるような理論的処理法は何一つ存在しない．原則として，衝突の現象はすべてこの理論の枠の外に出る．スペクトル項の計算においてさえ，この理論がうまくゆくのは最も簡単ないくつかの系に限られる．複雑な原子の量子化の問題を厳密な形で取りあげようとすると，すぐにいろいろな困難が現われる．また，いくつかの場合には明白な食い違いが起こる．たとえば（イオン化していない）ヘリウムのスペクトルや異常ゼーマン効果の場合がそれである．

さらに，この理論は混乱あるいは矛盾を免れない．方向量子化に関する規則は，その一例を示している．z 軸のまわりに回転対称性をもつ系の角運動量の成分 L_z を量子化する規則は，そのまま厳密に，原点のまわりで球対称性をもつ系にも適用されなければならない．このような系は原点を通るどのような軸のまわりにも回転対称性をもつからである．この場合われわれは，原点を通るどのような軸の方向に対しても角運動量の成分が $\hbar$ の整数倍でなければならないという不合理な規則に導かれる．

しかし前期量子論の原理に関する難点は，これらすべての欠陥や矛盾よりもなおいっそう深刻である．量子化規則は古典的運動方程式の解に課せられた純粋に形式的な制限である．それはまったく経験的な方法で決められてきた．このような古典軌道の量子化のための深い理由づけはまったく欠けている．実際，軌道の概念そのものが，量子化の現象ときわめて結びつき難いものである．それは，粒子が各瞬間にはっきり定まった位置と運動量をもち，これらの量が時刻のたつにつれて連続的に変わることを意味している．この条件の下で，フランクとヘルツの実験における電子のような粒子の軌道とは何であろうか．もしもこの電子が正確な軌道をもつならば，そのエネルギーは連続的に変化し，したがって標的原子と光量子によってエネルギーの交換をするという考えを捨てなければならない．言いかえれば，標的原子のエネルギー準位の量子化を断念しなければならない．逆にこの量子化を要請することは，結局のところ電子の正確な軌道という（古典的）概念を捨てること，そしてまったく論理的に，軌道一般の概念を捨てることになる．第2章と第4章で，この概念の放棄が完全に正当であることを知り，その物理的意味とその結果とを詳しく分析するであろう．ともかくわれわれは古典運動方程式を捨てるところまできた．この条件の下で，運動方程式の解のうちで原子の量子化軌道になるようなものにどのような物理的意味を与えるかを問題にすることができる．

疑いもなく，前期量子論は偉大な前進の一歩を示した．いくつかの簡単な規則から驚くほど多量の実験結果を予言し，スペクトルを現象論的に解明する一般的な方式をつくり上げ，またそのことにより，現代物理学の歴史において，事態を明確にする大きな役割を演じた．しかし古典力学と特別な規則とのこのようにかなり奇妙な結合は，どう見ても決定的な理論とは考えられなかった．

§17. 結　　び

われわれはこの章で，微視的な物理学の領域において古典理論が遭遇した主な困難を分析してきた．これらの困難は，物質と輻射の相互作用を詳しく研究するとすぐに現われる．本質的なことはこのスケールにおける不連続性の出現であって，これは不可分の作用量子 $\hbar$ の存在と結びついている．

この作用の原子論は確かに自然現象の基本的性格らしく思われる．巨視的なスケールでは，量子 $\hbar$ は無限小の量とみなされ，われわれは現象の古典的記述で満足することができる．そこでは，各瞬間に十分正確に定められ，時刻とともに連続的に変わる力学変数によって，物理系の変化が表わされる．これに対して，原子または原子以下の物理学では，$\hbar$ はもはや無視できなくなり，純粋に量子的な効果が現われる．

混乱は古典的な体系の全体に影響した．

電磁輻射の古典的で波動的な取り扱いは，物質と輻射のあいだのエネルギーと運動量の移行が，とびとびの不可分な量子によって起こるという実験的事実と相容れない．光電効果，特にコンプトン効果は，光を粒子の流れのように考えないとうまく説明できない．反対に，光子の仮説は干渉や回折の現象の存在と相容れない．これらの現象における光の挙動は，波の重ね合わせの現象に特有のものである．もしも古典物理学の言葉使いを守るならば，完全に筋道のとおった方法で光の現象の全体を説明することは不可能である．場合によって，二つの相容れない表現，すなわち粒子の流れと波の重ね合わせの，どちらか一方に訴えなければならない．この二つの表現のあいだの対応は基本関係（4）によって与えられ，そこには量子hが介入する．この波動－粒子の二重性を解釈する最も簡単な方法は，波動と粒子のあいだに統計的な結びつきを要請し，一点における波動の強さは，それに結びつけられた光子が，その点に見いだされる確率を与えるとすることである．

物質系について言えば，いくつかの量の量子化は，物質がニュートン力学にしたがう粒子からできているという考え方に一つの制限をつける．原子のエネルギー準位の量子化，適当な条件の下に置かれた原子または分子の方向量子化は，いずれも古典粒子論と相容れない実験的事実である．

一貫した理論を探求する際の手引きとして，古典理論のうちで保存できる要素を数え上げるのはよいことである．第一に目をひく事実はエネルギーと運動量の保存の基本法則に関することである．この章で論じた実験的事実はどれもこれらの法則を傷つけない．それゆえ，この法則は微視的現象のスケールにおいても確かに成り立つと思われる．第二に，古典理論を破産させたただ一つの原因は，作用の原子論である．巨視的なスケールでは，またもっと一般に，量子的不連続が無視できるものとみなされる場合はいつでも，古典理論はその有効性を完全に保つ．この第二の事実は，この章の終りの部分で述べた対応原理のもとになっている．前期量子論の成功は，この理論の基礎がこんなに弱いことを考えれば驚くべきものであるが，この基本的な発見的原理の豊かな生産力をはっきり示している．

演習と問題

1.　自由電子による単色光の光子の散乱（コンプトン効果）を考えよう．つぎの場合を想定して，波長のずれ，電子の反跳運動量の大きさと方向を，光子の回折角の関数として定めよ：a）電子が初めに静止している場合，b）電子が入射光子の方向に初期運動量Pをもつ場合．この二つの場合に，電子に移される運動量の最大値はどうか．

2.　ヤングの複スリットの実験について，光が波動的でありまた粒子的であるという二重性をもつことを論ぜよ．各光子に，二つの穴のうちの一つを通る正確な軌道を与えることは不可能であることを示せ．

3. 角運動量 l に比例する磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ をもつジャイロがある：$\boldsymbol{\mu} = Ml$. 磁気エネルギーの式 $-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathcal{H}$ から，一様な磁場 $\mathcal{H}$ における l の運動方程式を導き，ジャイロが角振動数 $\omega_L = M\mathcal{H}$（ラーモアの振動数）の歳差運動を行なうことを示せ．

4. 非相対論的な範囲で，電磁場のなかの電子の運動の古典方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mv) = e\left(\mathcal{E} + \frac{v}{c} \times \mathcal{H}\right) \qquad (\mathrm{a})$$

である．$\boldsymbol{A}$ と φ をそれぞれこの場のベクトル・ポテンシャルとスカラー・ポテンシャル（$\mathcal{E} = -\mathrm{grad}\ \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$； $\mathcal{H} = \mathrm{rot}\ \boldsymbol{A}$）としよう．この方程式はラグランジュ関数

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + e\left(\frac{v\cdot A}{c} - \varphi\right)$$

から導かれることを示せ．ラグランジュの共役運動量を計算しハミルトン関数をつくれ．

5. 問題4の方程式（a）は，静止質量 m を《相対論的質量》$M = m\ [1-(v^2/c^2)]^{-1/2}$ に置き換えれば，相対論の範囲でもやはり正しい．ラグランジュとハミルトンの形式的表現もやはり正しく，この方程式はラグランジュ関数

$$L = -mc^2\sqrt{1-v^2/c^2} + e\left(\frac{v\cdot A}{c} - \varphi\right)$$

から導かれることを確かめよ．この場合，ハミルトン関数は

$$H = \left[m^2c^4 + \left(p - \frac{e}{c}A\right)^2 c^2\right]^{\frac{1}{2}} + e\varphi$$

と書かれることを示せ．この式のなかで，$\boldsymbol{p}$ は運動量，すなわち x, y, z それぞれに共役な運動量 p_x, p_y, p_z を成分とするベクトルである〔注意：$\boldsymbol{p} = Mv + (e/c)\boldsymbol{A}$ で $H = Mc^2 + e\varphi$. H と $\boldsymbol{p}c$ は時空の4元ベクトルをつくり φ と $\boldsymbol{A}$ も同様である．そして $(H-e\varphi)^2 - (pc-eA)^2 = m^2c^4$ となる〕．

6. 質量 m の質点が x 軸上を動くように束縛され，原点からの距離に比例する引力 $(-Kx)$ を受けている（**調和振動子**）．この力学系にボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則を適用せよ．量子化軌道のエネルギー，周期，振幅を計算せよ．

7. ボーア＝ゾンマーフェルトの規則を適用することにより，水素原子の電子の円軌道を量子化せよ．量子化軌道のエネルギー，周期，半径を定めよ．特に，基底軌道のエネルギー，周期，半径の数値を計算し（$mc^2 = 0.51\ \mathrm{MeV}; (\hbar c/e^2) \simeq 137$），またこの特別な場合に相対論的補正を定めよ．量子数が大きくなった極限において，ボーアの振動数は古典電磁気学が予想するものに近づくことを確かめよ（**対応原理**）．

第2章　物質波とシュレーディンガー方程式

§1. 歴史的概観と後章の大体の計画

量子力学の基礎は1923年から1927年のあいだにつくられた．これについては二つの同値な定式化がほとんど同時に出された：行列力学と波動力学である．

行列力学(1)の出発点は前期量子論の批判的な分析であった．ハイゼンベルクによって展開された考え方はつぎのとおりである．すべての物理理論において，物理的に観測できる概念および量と，そうでない概念および量とをはっきり区別する必要がある．前者は必ず理論のなかに具体的な形で現われなければならないが，後者は修正されたり捨てられたりしてもさしつかえない．微視的現象について満足すべき理論をつくるときには，できる限り前者だけから出発しなければならない．ところで，前期量子論は実験的基礎を欠く一群の概念の助けを借りている．この概念が誤っていればそれだけ理論は動きのとれない状態に陥る．

電子軌道の概念は実験的基礎を欠く概念の例である．実際，水素原子のボーア軌道上の電子の運動を，実験的に追跡するということが考えられるかどうか，自問してみよう(2)．この運動の観測とは，電子の位置の測定をつづけて行なうことであり，許容誤差の幅はもちろん問題の電子軌道の平均半径aよりずっと小さくなければならない．十分に短い波長$\lambda \ll a$のX線を準備すれば，このような測定を考えることができる．しかし，コンプトン効果の法則にしたがって，X線の各光子と電子との衝突は，$h/\lambda (\gg h/a)$程度の大きさの運動量の移行を伴い，その結果観測しようとする電子の運動に，無視できない乱れをひき起こす．読者は容易に（問題1を参照），量子数nが小さくなればなるほど，この乱れが重要になることを確かめられるであろう．特に，電子が基底軌道（$n=1$）の上にあるとき，衝突によって移される平均エネルギーは，少なく見積ってもイオン化のエネルギーに

(1) W. Heisenberg, *Zeitsch. f. Phys.*, **33** (1925), 879; M. Born, P. Jordan, *Zeitsch. f. Phys.*, **34** (1925), 858; M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, *Zeitsch. f. Phys.*, **35** (1926), 557; P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, **A 109** (1925), 642.

(2) われわれが到達しようとする観測可能性の限界は，事がらの性質そのものから与えられたものである．測定を実際に行なうことのむずかしさは，ここでは問題にしない．

等しい．このように測定装置が観測される系におよぼす制御できない乱れによって，電子軌道を知ろうとするときに期待しうる精度が制限を受ける．量子数が小さい極端な場合には，乱れがきわめて大きいために，きわめて粗い軌道の観測すらまったくお手あげになってしまう．どんな実験によっても，電子が水素原子のなかで実際に一つの正確な軌道を描くことを確認できない以上，この軌道という概念を捨てることに反対する根拠は何もない．言いかえると，原子がはっきりと決まったエネルギーの状態にあるという事実は，必ずしも電子が各瞬間にはっきり指定される位置と運動量をもつことを意味しない(3)．

ハイゼンベルク，ボルン，ヨルダンの行列力学は電子軌道の概念を捨てる．この理論では，原子から放出される輻射の振動数や強さのように物理的に観測されるデータだけから出発し，各物理量にある行列を結びつける．ふつうの代数の量とはちがって，この行列は可換でない代数法則にしたがう(4)．この本質的な点に，新しい力学と古典力学との相違がある．それゆえ，量子系の力学変数の運動方程式は行列の方程式である．対応原理にしたがって，われわれはこれらの方程式が，対応する古典系の（普通の代数の量のあいだの）方程式と形式的に同じであることを認める．

シュレーディンガーの**波動力学**(5)はまったく違う形で現われた．この起源は物質波に関するL．ド・ブロイの業績(6)にある．物質と輻射についての統一した理論の基礎をつくるために，ド・ブロイの提出した仮説は，波動－粒子という二重性が微視的な対象のもつ一般的性質であり，物質も光と同じように波動と粒子の二重の姿を見せるということであった．彼は粒子の力学変数と，それに伴う波動に固有な量とのあいだに対応をつけ，なかば定量的な議論によってボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則を導き出すのに成功した．物質の波動性に関するL．ド・ブロイの推測は，数年後に波動光学の回折現象と類似の現象が発見されることによって，きわめて直接に確かめられるに至った．一方シュレーディ

---

(3) このことを，第1章の終りにフランクとヘルツの実験に関連して述べた議論と対比するがよい．そこでは衝撃電子に対する連続な軌道の存在が，標的原子のエネルギー準位の量子化と相容れないことを示した．この量子化を認めることはすなわち軌道の概念を捨てることになる．

(4) 行列の定義とその主な性質の解説は，第7章と第8章で与えられる．そこで行列と，あとで(§11)問題になる線形演算子とのあいだにある密接な関係がわかるであろう．

(5) E. SCHRÖDINGFR, *Ann. d. Phys.* [4], **79** (1925), 361と489; **80** (1926), 437; **81** (1926), 109. シュレーディンガーの主なノートはA. プロカによりフランス語に翻訳されている：E. SCHRÖDINGER, *Mémoires sur la Mécanique Ondulatoire*, Ed. Alcan, Paris, 1933.

(6) L. DE BROGLIE, *Nature*, **112** (1923), 540; 学位論文1924, *Annales de Physique* [10], **2** (1925).

ンガーはこの物質波の概念を追求し一般化して，与えられた量子系を表現する波動関数の伝播の方程式を発見した．きわめて簡単な一つの対応規則によって，この基本的な方程式を，対応する古典系のハミルトン関数から導くことができたのである．シュレーディンガーの方程式は波動力学の本質的な要素をつくっている．

シュレーディンガーが示したように(7)，波動力学と行列力学は同値である．これらは，非常に一般的な言葉によって表現することができる一つの理論の，特殊な二つの定式化である．このような量子論の一般的な形式の樹立は本質的にディラックによる(8)．こうして得られた量子論は物質粒子の非相対論的な理論である．これは電磁場の量子論(9)によって補充され，一貫した理論体系を形成した．これによると，非相対論的な近似の範囲で，電磁場と相互作用する物質粒子の系に関するすべての問題を扱うことができる．しかしこの理論の解釈と内容的統一とは，ボルン，ハイゼンベルク，ボーアの仕事(10)が出るまでは十分に理解されなかったことを付け加えておこう．本書の大部分で取り扱われるのは，こ

---

(7) E. SCHRODINGER, *Ann. d. Physik* [4], **79** (1926), 734.

(8) P. A. M. DIRAC, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford Clarendon Press, 初版 1930, 第 4 版 1958 Oxford（みすず書房リプリント版あり）（邦訳；ディラック《量子力学》朝永・玉木・木庭・大塚・伊藤訳，岩波書店）．

(9) P. A. M. DIRAC, *Proc. Roy. Soc.*, **A 114** (1927), 243 と 710；P. JORDAN, W. PAULI, *Zeitsch. f. Phys.*, **45** (1928), 151.

(10) M. BORN, *Zeitsch. f. Phys.*, **38** (1926), 803；W. HEISENBERG, *Zeitsch. f. Phys.*, **43** (1927), 172；N. BOHR, *Naturwissenschaft.*, **16** (1928), 245；**17** (1929), 483；**18** (1930), 73. またこの理論の物理的解釈についての深い解説は，W. HEISENBERG, *Die Physikalischen Prinzipien der Quantentheorie*, S. Hirzel, 1930, Leibzig（邦訳；ハイゼンベルク《量子論の物理的基礎》玉木・遠藤・小出訳，みすず書房），および N. BOHR, *Atomic Theory and the Description of Nature*, Cambridge Univ Press, 1934（デンマーク語より英訳）に見られる．

ここで問題になっている解釈はコペンハーゲン学派の統計的解釈であり，われわれがこの本で詳しく述べるのがそれである．激しい論争ののちに，この解釈が最終的には大多数の物理学者の同意を得たのである．しかし，これには不屈の反対者たちが何人かいた（そして今もいる）．そのなかで，特にアインシュタイン，シュレーディンガー，ド・ブロイをあげなければならない．結局のところ，問題はどんな実験的事実によっても解決されない論争，物理科学本来の領域よりはむしろ科学哲学の領域に入れる方が適切な論争であった．おもな議論の解説は，P. A. SCHILPP 編，*Albert Einstein, Philosopher-Scientist*, Tudor Publ. Co., New York, 1949, 1951（特にボーアとアインシュタインの論文を参照），および L. DE BROGLIE の著書 *La Théorie de la Mesure en Mécanique Ondulatoire*, Gauthier-Villars, Paris, 1957 に見られる．

［訳注］ この種の本で，現在日本で入手しやすいものをあげておく：ニールス・ボーア他《アインシュタインとの論争》林一訳，東京図書，1969；A. エ・シルヴァ，G. ロシャック《量子》高林・荒牧訳，平凡社，1970.

の理論体系とその応用である．相対論的量子力学の問題に手をつけるのは最後の章に入ってからであるが，おおむねディラックの相対論的電子論 (11) とその主な応用および主な難点の解説に限定する．

量子論を説明するいろいろな方法のうちで，最も手際よく満足を与えるものは，疑いもなく一般的形式論を用いる方法である．しかしそれには数学的な記号による方法の操作が必要であり，その抽象的な性格が，それによって表わされる物理的現実を覆い隠す恐れがある．波動力学は，波動と偏微分方程式というもっと親しみのある言葉を使うから，初めて学ぶにはより適当である．さらに，量子論の応用にあたっては，このかたちで利用されることが一番多く見られる．こういうわけで，われわれは波動力学の一般的解説から量子論に入ろう．物質波の概念に関する議論でこの章をはじめ，それからシュレーディンガー方程式をつくり，そのおもな性質を論じる．特に，どのようにしてこの方程式から定常状態のエネルギー準位が決められるかを示す．シュレーディンガー方程式にある程度の親しみをもつため，われわれは第3章を使って，1次元の量子系に関連する簡単な問題を取り扱い，これらの系に関するいくつかの定理を説明する．そこでわれわれは，量子論の解釈についての一般的な問題に手をつけることができよう．これが第4章の主題である．第5章を使って波動力学の形式論を展開し，第4章で定義された原理によって統計的に解釈する．第6章は波動力学の古典的近似を取り扱う．量子力学の一般的形式論について説明するのは波動力学の言葉で表わされた理論の概要を描写したのち（第7，8章）にする．

I．物　質　波

§2. 序　　説

光が波動と粒子の二つの姿をもつことは，物理学における量子の出現を告げる事象のうちで，最も顕著なものの一つである．物質もまたこの二重性をもつと考えてみよう．各光子に一つの電磁波を結びつけるのと同じように，各物質粒子に一つの波動を結びつけ，その角振動数 ω は粒子のエネルギー E と，アインシュタインの関係 $E=\hbar\omega$ によって結ばれるとする．この見方をとると，電子は共鳴する空洞のように考えられ，とびとびの固有振動数の列をもつことになる．こうしてエネルギー準位の量子化が説明される．

同時に，物質と輻射とは，波動と粒子の二重性格をもつ，同型ではあるが異なる変種の

(11) P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, **A 117** (1928), 610 および **A 118** (1928), 351.

対象であるとするような，一つの統一理論をつくる可能性が暗示される．ド・ブロイの物質波の理論において，彼を導いたこの推測は，あとで述べるように，完全に正しいことが知られた．

物質波のおもな性質は光学からの類推によって得られる．光子のときと同じように，一つの粒子に結びついた波動の強さの各点における値は，粒子をこの点に見いだす確率を与えるものとみなされる．波動の占める範囲の大きさが縮まれば，それだけ粒子は正確に位置づけられる．古典力学が成り立つための条件が実現するのは，時が経過しても波動のひろがりは十分小さいままで推移し，その結果，波動のひろがりを一点とみなして，粒子に正確な運動を与えうる場合である．光学において，波長 λ が無視できる長さとみなされるときはいつでも，類似の事情が生じる．これが幾何光学的近似であり，この場合波動に特有な現象は何一つ現われない．この近似が成り立つのは，光の伝わる媒質の光学的性質が，数波長程度の距離では，ほとんど一定に保たれる場合（$|\mathrm{grad}\,\lambda| \ll 1$）である(*)．このことは，場が無いかまたは場の変化が緩慢なとき，粒子の位置をあまり厳格な形で決めようとしない限り，古典粒子論がうまく適用されることを示唆する．この予想は，ほとんど静的な，ほとんど一様な場における原子または原子以下の粒子の運動に関する最もありふれた観測と一致する．たとえば静電磁場内の荷電粒子の軌道，シュテルン＝ゲルラッハによる磁場のなかでの常磁性原子線の偏りの実験など．このような極限の場合，物質波の理論は古典理論と同値でなければならない（対応原理）．

§3. 自由波束．位相速度と群速度

ここでは等質で等方な媒質中の伝播を問題にする．波動のうちで一番簡単な型は単色光平面波

$$e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{1}$$

であって，これは波長 $\lambda = 2\pi/k$ で波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向に一様な速度で伝わる振動を表わす．ここで考えている速度とは，同じ位相の平面の伝播速度すなわち**位相速度**

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k}$$

のことである．

(*) ［訳注］ 媒質の光学的性質はその屈折率で表わされ，屈折率に逆比例して光の波長は変化する．真空中の波長が λ_0 の光は，絶対屈折率が n のところでは波長 $\lambda = \lambda_0/n$ をもつから，n が場所の関数ならば λ もそうなる．この場合，$\mathrm{grad}\,\lambda$ は，考えている点で，λ の変化の最も大きい方向に単位長さだけいったときの λ の変化であるから，1波長の長さだけ離れた2点での λ の差 $\Delta\lambda$ は，$\Delta\lambda \simeq \lambda|\mathrm{grad}\,\lambda|$ で表わされる．ゆえに，$\Delta\lambda \ll \lambda$ ということは $|\mathrm{grad}\,\lambda| \ll 1$ と表わされる．

振動数 ω が $\boldsymbol{k}$ の方向には関係しないが，このベクトルの大きさには関係する場合もある．どんな波動も単色光平面波の重ね合わせと考えられるから，《分散法則》$\omega(\boldsymbol{k})$ を知れば，どのような波動についても，時の経過による挙動を決定することができる．

仮定により，各振動数 ω は粒子のはっきり決まったエネルギー

$$E = \hbar\omega \tag{2}$$

に対応する．それゆえ，波動（1）に，$\boldsymbol{k}$ の方向を向いたエネルギー E の一様な直線運動を結びつけるのは自然である．

古典論的近似を考えることによって，$\boldsymbol{k}$ には粒子の運動量 $\boldsymbol{p}$ を結びつけることができるのである．この近似を実際に行なうには，粒子に小さなひろがりをもつ波動を結びつける必要がある．波動（1）は明らかにこの条件を満たさない．しかしこれに近い波動ベクトルをもつ平面波を重ね合わせることによって，この条件を実現することができる．こうして**波束**

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \int f(\boldsymbol{k}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega' t)}\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}'$$

がつくられる．

f の絶対値と位相をそれぞれ A, α とする(*)．仮定により，A は $\boldsymbol{k}$ の狭い領域でだけ0と異なった値をとる．この波束の《運動》がどの程度まで，またどんな条件の下に，古典粒子の運動と同一視されるかを吟味することが問題である．

簡単のために，まず1次元の波束

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k'x-\omega' t)}\,\mathrm{d}k'$$

の問題を論じよう．

$$\varphi = k'x - \omega' t + \alpha$$

と置けば，$\psi(x,t)$ は，点 $k'=k$ を囲む幅 Δk の範囲 D に際立ったピークを示す関数 Aと，振動する関数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$ との積の積分になる．もしこの範囲で $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$ が（k' の関数として）何回も振動するならば，この範囲のいろいろな部分の積分に対する寄与は互いに打ち消しあい，ψ は無視できる程度になる．ψ の最も大きな値が得られるのは，位相 φ が D でほぼ一定になる場合，すなわち D で $\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}k \simeq 0$ の場合である（記号 $\mathrm{d}/\mathrm{d}k$ は，その関数の k' に関する導関数が $k'=k$ においてとる値を表わす）．大ざっぱに言えば，ψ が目立った値をとるのは，k' の関数としての $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$ が，D においてたかだか1回またはそれ以下

(*)［訳注］$f = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ の α は正しくは偏角と呼ぶべきであるが，原書では物理的意味を含ませて位相 (phase) と呼んでいる．

の振動しか行なわない場合，すなわち

$$\Delta k \times \left|\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}k}\right| \lesssim 1$$

となる場合である．

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}k} = x - t\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} + \frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}$$

であるから，波動 $\psi(x,t)$ は実質的に，条件 $\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}k = 0$ すなわち

$$x = t\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} - \frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}$$

によって定められる《波束の中心》を囲み，幅

$$\Delta x \simeq \frac{1}{\Delta k}$$

の範囲に集中している．この中心は一様な運動を行ない，その速度（上記 x の式参照）

$$v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \qquad (3)$$

は波動 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ の**群速度**と呼ばれる．波束のひろがりを無視できるものとみなした古典論による近似において，粒子の速度

$$v = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} \quad \left(\text{非相対論的近似では} \simeq \frac{p}{m}\right)$$

と同一視されるべきものは，この群速度 v_g であって，位相速度 v_φ ではない．

条件 $v = v_g$ と関係（2）から，L. ド・ブロイの関係

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \qquad (4)$$

が導かれる[12]．

この取り扱いは3次元の波束にも容易に拡張される．波束の中心は速度

$$v_g = \mathrm{grad}_k\, \omega \qquad (3')$$

の一様な運動で移動する．この群速度は粒子の速度

$$v = \mathrm{grad}_p\, E$$

と同一視されるべきものである．この条件と関係（2）を結びつければ，粒子の力学変数

(12) 厳密に言えば，この二つの条件により，k は p の関数として，一つの付加定数を除いて定められるだけである．p と k の対応関係が，座標軸上の正の向きの選び方によらないことを要請すれば，この定数は決まる．

と対応する波動に特有な量とのあいだの関係[13]

$$E = \hbar\omega, \qquad p = \hbar k \tag{5}$$

が得られる．この関係は光子の場合に求められた関係（第1章(4)）と同じである．

終りに，上の結果を相対性原理の見地から吟味しよう．

非相対論的近似において，エネルギーEは一つの定数を除いて定められる．エネルギーの零点を修正すると，その結果として振動数$\omega(k)$には定振動数ω_0が加わり（式(2)），関数$\psi(\boldsymbol{r},t)$には位相の因数$e^{-i\omega_0 t}$が掛けられる．このことは波束の運動に関する上記の結果にも，それから出てくる関係（5）にも何一つ影響を与えない(*)．

しかしながら，上記の取り扱い方は，非相対論的近似にまったく関係していない．相対性原理によれば，エネルギー$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$とそれに対応する振動数$\omega$を，一意的に定義することができる．エネルギー$E$と運動量$\boldsymbol{p}$とはそれぞれ同じ4元ベクトルの時間部分と空間部分である（便宜上$c = 1$とする）．振動数ωと波数ベクトル$\boldsymbol{k}$についても同じである．関係（5）はうまく相対性原理を満たす：それは4元ベクトル$(E, \boldsymbol{p})$と$(\omega, \boldsymbol{k})$が比例することを示している．

§4. ゆるやかに変わる場における波束

前述の諸結果，特に関係（5）は，ゆるやかに変わる場のなかの粒子の運動にも拡張される．古典論による近似の条件は，場の変動が波長のスケールに対して無視できる限り満たされる．

伝播の法則は幾何光学の法則である．特に，前節で調べたものと同じような限られたひろがりをもつ波束は，群速度に等しい速度で射線の道筋を進む．波束の運動を古典粒子の運動と同じように扱うことができるためには，つぎのことが必要である．

a）（角）振動数ωに対応する射線は，エネルギー$E = \hbar\omega$の古典軌道と一致する．

b） 各射線に沿っての群速度は，対応する古典粒子の速度に等しい．

古典粒子の軌道は最小作用の原理（第1章(12)）によって決められる．もしも与えられたエネルギーEの軌道に考えを限るならば，ラグランジュ関数は，第1章(13)によって，$\boldsymbol{p}\cdot(\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t) - E$に等しく，上の原理は

---

(13) （5）の第二の関係は一つの定数ベクトルを除いて定まる．この関係が軸の回転に対して不変であることを要請すると，この定数ベクトルは零ベクトルに等しくなる（注(12)を参照）．

(*) ［訳注］ 位相速度は変化するが，粒子の速度として観測にかかる群速度には影響しない．

$$\delta I_{12} \equiv \delta \int_{M_1}^{M_2} \boldsymbol{p} \cdot d\boldsymbol{r} = 0$$

と書かれる．これは，点 M_1 と M_2 とを結ぶ曲線に沿って計算した積分 I_{12} が，この曲線を粒子が M_1 から M_2 まで実際に動く軌道とするとき，停留値をとることを表わす．運動量(14) $\boldsymbol{p}$ は，まったく一般の場合，位置 $\boldsymbol{r}$ と速度 $\boldsymbol{v} = (d\boldsymbol{r}/dt)$ との関数，言いかえれば曲線上の位置と接線の方向との関数である(*)．スカラー・ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ 内の非相対論的粒子の場合は，

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \qquad \text{かつ} \qquad \boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v} \tag{6}$$

で，運動量と速度は平行である（$\boldsymbol{p}/\!/d\boldsymbol{r}$）．しかし，もっと一般の場合，たとえば磁場内の粒子のようにこの条件が満たされない場合(14) でも，原理は同様に成り立つ．

与えられた振動数 ω に対しては，幾何光学の射線はもう一つの変分原理すなわちフェルマーの原理によっても定められる．それは

$$\delta J_{12} \equiv \delta \int_{M_1}^{M_2} \boldsymbol{k} \cdot d\boldsymbol{r} = 0$$

と書かれ，$\boldsymbol{k}$ は波数ベクトルである．点 M_1 と M_2 を結ぶ一つの与えられた曲線に沿って計算された積分 J_{12} は，この曲線に沿っての光学距離である(**)．フェルマーの原理は，M_1 と M_2 を結ぶ射線が，光学距離に停留値を与える曲線であることを表わす．一般には（等位相面に垂直な）$\boldsymbol{k}$ は，この曲線上の位置とこの曲線の接線との関数である(***)．位相速度が方向に無関係な等方性媒質のなかでは，ベクトル $\boldsymbol{k}$ は曲線の接線の向きをもち，

---

(14) すべての混乱を避けるために，いつでも運動量とは，三つの座標に対するラグランジュの共役運動量を三つの成分にもつベクトルであると定義し，速度と質量の積は狭義の運動量と呼んで区別する．

［訳注］ quantité de mouvement を狭義の運動量と訳すことにしたが，磁場があるときなどには $m\boldsymbol{v}$ を運動量とは呼ばないのが普通である．

(*) ［訳注］ 接線の方向は $\boldsymbol{v}$ の方向を与えるだけでその大きさを与えてくれないから，この文章はおかしい．著者の思い違いであろう．

(**) ［訳注］ 絶対屈折率 n の等方性媒質中を光が l だけ進むとき，nl のことを光学距離という．$k = 2\pi/\lambda$ であり，$\lambda = \lambda_0/n$（λ_0 はその光の真空中での波長）であるから，

$$\int \boldsymbol{k} \cdot d\boldsymbol{r} = \int k\, ds = \frac{2\pi}{\lambda_0} \int n\, ds$$

となる．したがって，正確に言えば J_{12} は光学距離の $2\pi/\lambda_0$ 倍である．

(***) ［訳注］ 異方性物質では電場の方向によって誘電率 ε が異なる．もっと一般的に言えば ε はテンソルである．したがって，屈折率も光の電場ベクトルの振動方向によって違ってくる．ゆえに，横波である光の場合には，$\boldsymbol{k}$ は位置と光の進行方向だけでなく，さらに偏光の方向にも依存する．

その長さ $k=2\pi/\lambda$ は曲線上の位置だけに関係し，伝播方向には関係しない．しかしフェルマーの原理は非等方性媒質にもそのまま適用される．

二つの変分原理の形がまったく似ていることに注意されたい．振動数 ω に対する射線と，エネルギー E をもつ古典軌道とを一つにする（条件 a)）ためには，$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{p}$ とが比例すればよい．

$$\boldsymbol{p}=\alpha\boldsymbol{k}.$$

比例定数 α は条件 b）によって決まる． 群速度 $\boldsymbol{v}_g$ は振動数 ω の $\boldsymbol{k}$ に関する勾配である．したがって

$$\boldsymbol{v}_g=\frac{1}{\hbar}\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\,E=\frac{\alpha}{\hbar}\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{p}}\,E.$$

粒子の速度について言えば，それは式

$$\boldsymbol{v}=\mathrm{grad}_{\boldsymbol{p}}\,E$$

で与えられる．これら二つの速度は $\alpha=\hbar$ のときに等しい．

こうして，きわめて一般的な形で関係（5）がもう一度得られた．

ゆるやかに変わるスカラー・ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ 内の非相対論的粒子の場合，波動は等方性媒質中を伝わり，波長 λ は関係

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2m(E-V(\boldsymbol{r}))}} \tag{7}$$

によって与えられる（式（6）を参照）．

§5. 原子のエネルギー準位の量子化

物質波の理論によれば原子のエネルギー準位の量子化はきわめて簡単に理解される．

考えをはっきりさせるために，水素原子の問題にもどろう．エネルギー E の楕円軌道を考える．対応関係（5）により，軌道の各点において波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ が決められる．軌道の一点における波動の位相は，一まわりするたびに $\oint\boldsymbol{k}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ だけ増加する．定常波がつくられるためには，この位相が 2π の整数倍となることが必要である．このことから量子化条件

$$\oint\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\hbar\oint\boldsymbol{k}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=nh\qquad(n\ \text{は正の整数})$$

が与えられ，この式はまた，第1章の記号を使えば，

$$\oint p_r\,\mathrm{d}r+\oint p_\varphi\,\mathrm{d}\varphi=nh$$

と書かれる．同じような考え方により，周期運動と多重周期運動の場合のボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則をもう一度導くこともできる．

もちろん，上に述べた結果は，波長と波数ベクトルの概念が意味をもつような幾何光学的近似においてだけ正しい．特に，小さい量子数に対しても量子化条件が同じ形式を保つとはけっして断言できない．ただ一つの確かなことは，定常波の実現に結びついてエネルギーが量子化されるという事実そのものである．

もっと一般の場合を同様に取り扱うためには，古典光学において幾何光学から波動光学(15) へ移るときに行なったのと同じような拡張を，この近似理論について行なわなければならない．物質波の存在を要請したからには，その伝播の方程式を見いださなければならない．この問題に入る前に，物質粒子の概念はけっして捨てられないにもかかわらず，物質の波動的性質がどのようにして実験的に明らかにされうるか——また実際に明らかにされたか——ということを調べよう．

§6. 物質波の回折

観測の実際的な可能性は，明らかに調べられる対象の波長による．巨視的な対象では，ふつう出てくる波長がきわめて微小なので，波動的効果はすべて実際上見いだされない．これに反して原子的な大きさの対象では，X線の波長と同じ程度の波長をもつ線束（ビーム）をつくることができ，結晶による回折と同じ現象を起こさせる可能性がある(16)．

物質波の回折に関する最初の実験は電子を使ったもので，デヴィソンとガーマー (1927)，G. P. トムソン (1928)，ルップ (1928) によって行なわれた．

デヴィソンとガーマーは単結晶による反射を使った実験を行なって，ラウエの斑点を観測し，G. P. トムソンとルップは薄い多結晶の標的を通過するときの回折によって得られるデバイ＝シェラーの円環を調べた．

(15) この理論に与えられた波動力学という名の由来である．

(16) 概念をはっきりさせるために，ブラウン運動をする粒子を考えよう．この種の粒子のうちで最小のものは，1 μ 程度の直径と，質量

$$M \simeq 10^{-12}\,\mathrm{g}$$

をもっている．

常温における熱力学的平衡状態では，その運動エネルギー $3kT/2$ はおよそ 0.4×10^{-13} erg であり（この k はボルツマン定数），したがって平均波長は

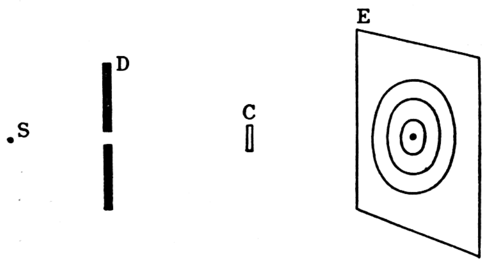
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3MkT}} \simeq 5\times10^{-6}\,\text{Å}$$

になる．同じエネルギーでヘリウム原子は波長 $\lambda \simeq 0.9\,\text{Å}$，中性子は $\lambda \simeq 1.8\,\text{Å}$，電子は $\lambda \simeq 77\,\text{Å}$ をもつ．

これらの実験において，入射線束は電場のなかで電子を加速することによってつくられた．Eを電子ボルトで表わした電子のエネルギーとすれば，オングストロームで測った電子のド・ブロイ波長は

$$\lambda = \frac{12.2}{\sqrt{E_{(\mathrm{eV})}}}\,\text{Å}$$

に等しい．エネルギーが 1 keV と 100 keV のあいだにあれば，これはふつうの結晶スペクトル分析の範囲の波長である．結晶格子のパラメータを知っていれば，干渉像から電子の波長の実験値を導き出すことができる．ド・ブロイの理論値はこの実験値と完全に一致した．



2·1 図　多結晶の薄片による電子の回折．電子源Sから出た電子線は絞りDによって揃えられたのち，多結晶の薄片Cによって回折される．回折像はスクリーンEの上で観測される．

同じような結晶回折の実験は，ヘリウム原子および水素分子から成る等エネルギー粒子線を使って行なわれ(シュテルン，1932)，ド・ブロイの関係に新しい証明を与えた．ここに出てくる波長とは，噴流の各原子あるいは各分子の重心の運動に伴う波長である．近ごろは核反応器から取り出されるような遅い中性子の線束によっても，同じことが観測される．これらすべての実験は，波動的構造が電子だけに見られる特殊なものではなく，まさに物質的対象のもつきわめて一般的な性質であることを明瞭に示している．

§7. 物質の粒子的構造

物質波と古典波動光学の類似を追求しながら，物質粒子の概念を無条件に捨て去り，輻射の理論において電磁場の果たす役割を波動 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ が果たすような波動論によって，古典論を置き換えることが可能であるかどうかと自問することができる．

物質粒子，すなわち局所的にかたまったエネルギーと運動量の粒というイメージは，エネルギーと運動量の連続的な分布をもつ連続的な波というイメージで置き換えられよう．古典力学の粒子は，実際に有限ではあるが十分に微細なためにみかけ上無視できる大きさの波束となるであろう．すでに知ったように，このような波束はある制限条件の下で古典粒子の運動法則にしたがい，その法則はまさしく古典力学が正しいものであることを示す

ものであった. 実際のところは, 場がないときでさえ, 波束はこの粒子の外見をいつまでも保つことができない. なぜならそれは移動するにつれてすこしずつひろがり, 十分長い時間のあとでは, 空間のどんなにひろい部分をも占めるようになってしまうからである(問題6を参照)[17]. この条件の下で, 物質がこれほどしばしばちゃんと局在した粒子の形で現われるのは驚くべきことである.

しかし, この種の純波動理論の難点は, 物質波の回折実験の経過を注意深く吟味すると, なおいっそう明瞭になる. ここで多結晶の薄片を通過する等エネルギーの電子線束を考えよう. 薄片のもう一方の側の適当な場所に置かれたスクリーンには, 透過波による中央の斑点が, 回折波による同心円環に取り巻かれているのが観測される. 考えをはっきりさせるために, 入射線は空間のなかで十分に限界を定められた波束 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ であるとしよう. これは (2·1 図で) シャッターを備えた紋りDの背後に等エネルギーの陰極線の強い源Sを置き, シャッターの開放時間を一回限りにすれば得られる. この波はそこから伝播し, 薄片Cを通り, 透過波と回折波に分かれ, スクリーンの上に前述の干渉像をつくる. 仮定により, 問題になっているのは本質的に連続性をもった波動であり, 観察される干渉像についても事情は同じでなければならない. もしすべてのものを同じにしたまま入射波の強さを減らす (たとえば紋りDから源Sを遠ざける) ならば, 干渉像が連続的であることをやめない限り, 干渉の斑点の強さはそれにつれて減少するはずである. 実験はこの予想に反する. 事実, 干渉像ははっきり位置づけられた衝突点の集合からできている. もしも波動の強さを減らすならば, これらの衝突点の個数がそれにつれて減少する. 強さをきわめて小さくした極限においては, 一つの衝突点が, あるときは中央の斑点上にあり, あるときは干渉環の一つの上にあることを, 場合によって観測するにすぎない. この場合最も簡明なのは, 衝突点一つごとに一つの物質粒子, つまり電子が飛んできてそこに当たったと考えることである.

ここで述べた事情と, 第1章で論じた格子による光の回折の実験とのあいだに, 完全な対応があることに気がつくであろう. この対応を最後まで推し進め, 波動－粒子の二重性に対して与えうる最も簡明な解釈は統計的解釈, すなわちスクリーンの各点における波動の強さは, そこに衝突が起こる確率を与えるという解釈であると結論することができる.

§8. 波動－粒子二重性の普遍的性格

これらすべてのことから, 微視的な対象は, きわめて一般的な性質として, みかけ上は

---

[17] 調和振動子の場合には, 波束がいくらでもひろがるという, 非常に一般的なこの規則の例外になっている (第6章参照).

両立しない二つの姿で現われなければならないという結論に達する．一方では波に特有な重ね合わせの性質を示す波動の姿であり，他方では粒子の姿，すなわち局在するエネルギーと運動量の粒という姿である．これら二つの姿のあいだには等式（5）で与えられた普遍的な対応関係が存在する．さらに，粒子とそれに伴う波とのあいだの結びつきは統計的な結びつきであって，のちにこれを詳しく述べる機会があるであろう．

II．シュレーディンガー方程式

§9．物質粒子の数の保存法則

これまで述べたことはすべて，光の性質と物質の性質のいちじるしい類似を明らかにしている．それにもかかわらず，重大な違いに注意する必要がある．最も簡単な状況の下でさえ，光子の個数は放出や吸収によって時間の経過とともに変わりうる．反対に，電子の個数や，もっと一般に物質の素粒子の個数は一定のままである．これは原子物理学における最もありふれた現象の分析が示すことであり，粒子系の量子力学の成功そのものが，この重要な保存法則の正しいことを立証するであろう．

実際は絶対的な保存法則が問題になるのではなく，物質と光とのあいだの差異も，いま述べたほどきわだったものではない．陽電子，つまり電子と同じ質量mと，反対の電荷とをもつ粒子の発見（アンダーソン，1932）以来，ある条件の下では電子－陽電子の対が生じうること（物質の放射），また逆に，一つの陽電子と一つの電子が衝突によって消しあいうること（物質の吸収），その際輻射の形でエネルギーが発散されることが知られている．物質とエネルギーの同等性の法則にしたがって，電子－陽電子の一対を創生するのに要するエネルギーは少なくとも $2mc^2(\simeq 1\,\mathrm{MeV})$ に等しい．電子（または陽電子）が放射されるもう一つの場合は，原子核のβ崩壊のときである．もし原子物理学の現象に話を限るならば，陽電子は存在せず，核は安定しており，やりとりするエネルギーは電子－陽電子を創りうる最小値よりも小さい．このとき上に述べた保存法則は，損われない．今後はこのことを仮定する．

この法則があるので，物質の量子論をつくり上げまた解釈することがたいそう簡易化される．われわれが考察するいろいろな量子系は，はっきり決まった個数の物質粒子によって構成される．最も簡単な系は外力の場のなかにある1粒子，たとえば1電子の系である．各瞬間tにおいてそれに伴う波動は，この粒子の位置座標の関数 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ である．水素原子は相互に作用する二つの粒子，電子と陽子の系であり，これに伴う波動 $\Psi(\boldsymbol{r}_e,\boldsymbol{r}_p,t)$ はこれら二つの粒子の位置座標 $\boldsymbol{r}_e,\boldsymbol{r}_p$ に依存する．複雑な原子は，位置$\boldsymbol{R}$によって定められた電荷Zeの核と，それぞれベクトル $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_Z$ によって位置を決められたZ個

の電子から形づくられている．これに伴う波動はある関数 $\Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_Z, t)$ である．同じようにして，もっと複雑な系の波動関数を定めることもできる．

§10. 波動方程式の必要性とこの方程式に課せられた条件

われわれがすでに見たように，1粒子に伴う波動の，ある点とある瞬間における強さは，その瞬間にその点において粒子を見いだす確率を与える．もっと一般にわれわれは，一つの量子系の波動関数 Ψ がその力学的状態を完全に決定すること，言いかえれば，与えられた瞬間 t におけるこの系のいろいろな力学的性質に関して行なわれうるすべての予想が，この瞬間における Ψ についての知識から導かれるということを要請する．それゆえ，この理論の中心問題はつぎのようになる：与えられた初期時刻 t_0 における波動関数を知って，その後の各時刻におけるこの関数を決定せよ．これを行なうためには，波動 Ψ の伝播の方程式を知らなければならない．

どんな演繹的推論を行なっても，この方程式に到達しえないことはきわめて明瞭である．数理物理学の方程式はすべてそうであるが，この方程式も仮定されるべきものであり，これが正しいとされるのは，方程式による予想と実験結果との照合がうまくゆく場合に限られる．とはいえ，さきに定めた Ψ の解釈を保とうとすれば，波動方程式の選び方はいくつかの先験的な条件によって制限される：

A）方程式は線形で同次でなければならない．そうするとこの波動は波動の一般的な特徴である重ね合わせの性質をもつ．すなわちもし Ψ_1 と Ψ_2 が方程式の解ならば，これらの関数の線形結合 $\lambda_1\Psi_1+\lambda_2\Psi_2$ もすべて同様にその解である．

B）方程式は時刻に関して1階の微分方程式でなければならない．そうすると，物理系の力学状態が，Ψ を与えることによって完全に決められるという仮定にしたがって，与えられた初めの瞬間における Ψ を知りさえすれば，その後の経過はすべて決定される．

また一方，この理論による予想は，古典力学が成り立つ範囲では，それによる予想と一致しなければならない．言いかえれば，波束の運動について幾何光学的近似をとるとき，この方程式はド・ブロイの理論と同じ法則を導き出さなければならない．このことは，それが古典力学のある方程式と形式的な類似をもつことを暗示している（対応原理）．

これらすべての考察によって，われわれはシュレーディンガー方程式をきわめて自然に見いだすことができる．この計画を実行する前に，今後引きつづいてたいそう役に立つ数学的な概念，すなわち演算子の概念を導入しよう．

§11. 演算子の概念

関数 $\partial\Psi/\partial t$，すなわち Ψ の t に関する導関数を考えよう．演算子 $\partial/\partial t$ が関数 Ψ に作用して関数 $\partial\Psi/\partial t$ をつくるということができる．一般に，ある演算により，ある関数空間の各関数 Ψ に対応して，同じ空間の関数 Ψ' が一つそしてただ一つだけはっきり定められるとき，Ψ' はこの空間のある演算子 A が Ψ に作用して得られた関数であると言い，

$$\Psi' = A\Psi$$

と書く．

また，関数 $\lambda_1\Psi_1+\lambda_2\Psi_2$，すなわちこの関数空間に属する二つの関数の（複素）定係数による線形結合に対するAの作用が，

$$A(\lambda_1\Psi_1+\lambda_2\Psi_2) = \lambda_1(A\Psi_1)+\lambda_2(A\Psi_2)$$

によって与えられるとき，Aは線形演算子であるという．

一つの粒子に伴う波動関数

$$\Psi \equiv \Psi(\boldsymbol{r},t) \equiv \Psi(x,y,z,t)$$

に作用しうる演算子のうち，特に重要な二つの型の線形演算子をあげることができる：

1° さきに考えたような微分演算子 $\partial/\partial x$，$\partial/\partial y$，$\partial/\partial z$，$\partial/\partial t$；

2° $f(\boldsymbol{r},t)$ という形の演算子で，その作用は，関数 Ψ に関数 $f(\boldsymbol{r},t)$ を掛けるということである．

いくつかの線形演算子から出発して，つぎのような代数的演算により，新たにいくつかの線形演算子をつくることができる：

a） 演算子Aに定数cを掛ける乗法：

$$(cA)\Psi \equiv c(A\Psi).$$

b） 二つの演算子AとBの和 $S = A+B$：

$$S\Psi \equiv A\Psi+B\Psi.$$

c） 演算子Bに演算子Aを（左から）掛けた積 $P = AB$：

$$P\Psi \equiv AB\Psi \equiv A(B\Psi).$$

和の場合とは違って，二つの演算子の積は可換でない．これが，演算子の代数と普通の代数とのあいだのきわめて重大な相違である．積 AB は必ずしも積 BA と同じではない．第一の場合は，B がまず Ψ に作用し，そのあとで A が関数（$B\Psi$）に作用して最終結果を与える．第二の場合は，A と B の役割が入れ替わる．この二つの量の差 $AB-BA$ は A と B の**交換子**と名づけられている．これを記号 $[A, B]$ で表わす：

$$[A, B] \equiv AB - BA. \tag{8}$$

この差が0ならば，これら二つの演算子は交換するという．すなわち，

$$AB = BA.$$

交換しない演算子の例として，演算子 $f(x)$，つまり与えられた x の関数 $f(x)$ を掛けることと，微分演算子 $\partial/\partial x$ をあげよう．事実，Ψ が何であっても，

$$\frac{\partial}{\partial x}\cdot f(x)\Psi = \frac{\partial}{\partial x}(f\Psi) = \frac{\partial f}{\partial x}\Psi + f\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi.$$

言いかえれば

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},\ f(x)\right] = \frac{\partial f}{\partial x} \tag{9}$$

であり，特別の場合として

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},\ x\right] = 1. \tag{10}$$

反対に，$\partial/\partial x$，$\partial/\partial y$，$\partial/\partial z$，$\partial/\partial t$ のような微分法の演算子はどの二つも交換する．

線形演算子の和と積によってつくられる線形演算子の典型的な例はラプラス演算子

$$\triangle \equiv \mathrm{div\ grad} \equiv (\nabla\cdot\nabla) \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

であり，これはベクトル演算子である勾配（ナブラ）$\nabla \equiv (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ とそれ自身との内積とみなすことができる．

§12. 1自由粒子の波動方程式

物質波の理論によると，一つの自由粒子の波動方程式は（非相対論的近似の範囲内で）まったく一義的に書き下される．実際，波動 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ は，単色光平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar}$ の重ね合わせ

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \int F(\boldsymbol{p})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{11}$$

であって，平面波の振動数 $E/\hbar$ と波数ベクトル $\boldsymbol{p}/\hbar$ とは，粒子のエネルギーと運動量とを結びつける関係式

$$E = \frac{p^2}{2m} \tag{12}$$

によって結びつけられている．等式（11）の両辺の偏導関数をとると——この種の研究では，収束の問題を考慮の外においてよいから，それについては論じないことにして——つぎの式が順に得られる：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=\int E\,F(\boldsymbol{p})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{13}$$

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\Psi(\boldsymbol{r},t)=\int \boldsymbol{p}\,F(\boldsymbol{p})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{14}$$

$$-\hbar^2\triangle\Psi(\boldsymbol{r},t)=\int p^2\,F(\boldsymbol{p})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}. \tag{15}$$

関係式 (12) によって，等式 (13) と (15) の記号 $\int$ のなかにある式は比例する．それゆえ，積分自身も同じ比例係数だけの違いである．したがって

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi(\boldsymbol{r},t). \tag{16}$$

これが1自由粒子に対するシュレーディンガーの方程式である．これは確かに条件 A) と B) を満たす．さらに，これを導き出してきた方法そのものによって，これは対応原理の要求を満たしていることが確かめられる．事実，古典力学との形式的な類似は実現されている．方程式 (16) はある意味において古典的な方程式 (12) の量子的翻訳であり，エネルギーと運動量は，この量子的言語においては，対応規則

$$E\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\qquad \boldsymbol{p}\longrightarrow\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla \tag{17}$$

にしたがい，波動関数に作用する微分演算子によって表わされる．そして，量 $p^2=p_x^2+p_y^2+p_z^2$ は演算子

$$-\hbar^2\triangle=\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

によって表わされる．

もとになっている関係式 (12) と同様に，方程式 (16) は明らかに相対性原理を満たさない．しかし，本来のド・ブロイ理論にはこういう限界はない．自由粒子の相対論的方程式を得るために，関係式 (12) を相対論にしたがったエネルギーと運動量の関係式で置き換えて，上述の議論を繰り返してみることができる．正確な関係式 $E=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}$ は根号を含むから不便である．この困難を避けるために，関係式

$$E^2=p^2c^2+m^2c^4 \tag{18}$$

を利用することができる．これから

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi=-\hbar^2c^2\triangle\Psi+m^2c^4\Psi$$

が導かれ，これはまた，ダランベール演算子

$$\Box\equiv\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\triangle$$

を使うと，

$$\left(\Box+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right)\Psi(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{19}$$

と書かれる．

方程式（12）と（16）のあいだにある対応と同じ形式的対応が，方程式（18）と（19）のあいだに見いだされる．

方程式（19）は**クライン＝ゴルドンの方程式**と呼ばれ，相対論的量子論において重要な役割を果たす．これは判定条件 B）を満たさないから，波動 Ψ の物理的解釈をやり直さない限り，波動方程式として採用されない(*)．実際は，一つの波動がただ一つの粒子の力学的状態を表わしうるという事実がまったく正しいのは，非相対論の限界のなかでだけ，すなわち，粒子数の保存法則が満たされるときだけなのである．それゆえ今後は，非相対論的波動方程式の研究だけに限定する．

§13. スカラー・ポテンシャル内の粒子

ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかの1粒子の波動方程式をつくるために，われわれはまず《幾何光学的近似》の条件の下で考え，ド・ブロイの理論にしたがって移動する波束 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ に対して伝播の方程式をつくってみよう．

波束の中心は古典粒子のように移動するから，その粒子の位置と運動量とエネルギーとをそれぞれ $\boldsymbol{r}_{\text{cl.}}$，$\boldsymbol{p}_{\text{cl.}}$，$E_{\text{cl.}}$ で表わそう．これらの量は関係式

$$E_{\text{cl.}}=H(\boldsymbol{r}_{\text{cl.}},\boldsymbol{p}_{\text{cl.}})\equiv\frac{\boldsymbol{p}_{\text{cl.}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}_{\text{cl.}}) \tag{20}$$

によって結ばれている．$H(\boldsymbol{r}_{\text{cl.}},\boldsymbol{p}_{\text{cl.}})$ は古典的ハミルトン関数である．ここで述べる議論が成り立つために欠かせない条件ではないけれども，われわれは $V(\boldsymbol{r})$ が直接には時刻に関係しないこと（保存系）を仮定する．その結果 $E_{\text{cl.}}$ は時間に対して定数となり，一方 $\boldsymbol{r}_{\text{cl.}}$ と $\boldsymbol{p}_{\text{cl.}}$ とははっきり決まった t の関数である．ここで考えている近似の条件の下では，波束のひろがり程度の大きさの領域で，$V(\boldsymbol{r})$ は実際上定数である．したがって

$$V(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r},t)\simeq V(\boldsymbol{r}_{\text{cl.}})\Psi(\boldsymbol{r},t). \tag{21}$$

他方，$\boldsymbol{p}_{\text{cl.}}$ の相対的な変動を無視できるほど十分短い時間に限れば，$\Psi(\boldsymbol{r},t)$ は（11）の型の単色光平面波の重ね合わせと考えられ，その振動数は $E_{\text{cl.}}/\hbar$ の近くに，その波動ベクトルは $\boldsymbol{p}_{\text{cl.}}/\hbar$ の近くにある．したがって

(*)［訳注］ 解釈をやり直しても，これを電子に対する方程式と考えることはできない．電子に対するディラックの方程式は別の方法で求められる．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)\simeq E_{\text{cl.}}\Psi(\boldsymbol{r},t),\qquad \frac{\hbar}{i}\nabla\Psi(\boldsymbol{r},t)\simeq \boldsymbol{p}_{\text{cl.}}(t)\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{22}$$

となり，最後の式の発散をとれば，

$$-\hbar^2\triangle\Psi(\boldsymbol{r},t)\simeq p_{\text{cl.}}^2\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{23}$$

が得られる．関係式 (20) を利用して関係式 (21)，(22)，(23) を結びつけると，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi+\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi-V\Psi\simeq\left(E_{\text{cl.}}-\frac{p_{\text{cl.}}^2}{2m}-V(\boldsymbol{r}_{\text{cl.}})\right)\Psi\simeq 0$$

となる．

波束 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ は少なくとも近似的に，われわれが探しているような型の波動方程式を満たしている．ポテンシャルのなかの1粒子の波動方程式としてこの方程式を採用しようと考えるのは自然であり，われわれはきわめて一般に，《幾何光学》的近似の条件が満たされないときでも，波動 Ψ が方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+V(\boldsymbol{r})\right)\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{24}$$

を満たすということを要請する．これがポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかの1粒子に対するシュレーディンガー方程式である．

§14. 電磁場のなかの荷電粒子

上の議論は，ポテンシャルVが直接に時刻の関数であるようなもっと一般の場合にも，あるいはさらに，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ とスカラー・ポテンシャル $\varphi(\boldsymbol{r},t)$ から導かれる電磁場のなかに，電荷 e の粒子がある場合にも繰り返される．後者の場合，古典的関係式 (20) は関係式

$$E=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right)^2+e\varphi(\boldsymbol{r},t) \tag{25}$$

によって置き換えられる（第1章の問題4参照）．《幾何光学》的近似の条件が満たされるとき，波束の運動を調べると，われわれは波動方程式として，方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\varphi\right]\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{26}$$

をとることになる．これが電磁場のなかの荷電粒子のシュレーディンガー方程式である[18]．

方程式（24）と（26）は方程式（16）の拡張であり，これらについても同じ注意をすることができる．これらは確かに時刻に関して1階の線形同次偏微分方程式である（条件A）とB））．また，これらは（17）によって定められた対応の手続きによって，それぞれ古典的関係式（20）と（25）から導き出される．

§15. 対応によってシュレーディンガー方程式をつくる一般的な規則

このような対応の手続きを一般化することによって，もっと一般の系に適用されるシュレーディンガー方程式をつくるための体系的方法を定式化することができる．

一つの古典力学系を考え，その運動方程式はハミルトン関数 $H(q_1,\cdots,q_R\,;p_1,\cdots,p_R\,;t)$ から導かれるとしよう．この関数は配置空間における系の（一般化）座標 $q_1,\cdots,q_R$ と，それに対する共役（一般化）運動量 $p_1,\cdots,p_R$ と，時刻 t とによって決まる．この系の全エネルギーは

$$E=H(q_1,\cdots,q_R\,;p_1,\cdots,p_R\,;t) \tag{27}$$

である．この古典系に一つの量子系を対応させ，その力学的状態を配置空間で定義された波動関数 $\Psi(q_1,\cdots,q_R\,;t)$ で表わし，方程式（27）の両辺に置換

$$E\longrightarrow \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},\qquad p_r\longrightarrow\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q_r}\qquad (r=1,2,\cdots,R) \tag{28}$$

を行ない，これら二つの量を演算子とみなして Ψ に作用させたとき，その結果が等しいと書くことによって，この量子系の波動方程式をつくる．こうして得られた方程式が，対応する量子系に関するシュレーディンガー方程式である．

---

[18] 方程式（26）の左辺において，演算子 $\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2$ はベクトル演算子 $\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$ とそれ自身との内積を表わす．言いかえると，これが Ψ に作用してできる関数は，式

$$\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)\Psi\equiv-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{e\hbar}{\mathrm{i}c}\left(A_x\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}(A_x\Psi)\right)+\frac{e^2}{c^2}A_x^2\Psi$$

と，この式の x を y および z に置き換えて得られる他の二つの式との和，すなわち

$$-\hbar^2\triangle\Psi-2\frac{e\hbar}{\mathrm{i}c}(\boldsymbol{A}\cdot\nabla\Psi)+\left(-\frac{e\hbar}{\mathrm{i}c}\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\frac{e^2}{c^2}A^2\right)\Psi$$

である．この計算を通じて，演算子 ∇ と演算子 $\boldsymbol{A}$ の成分はいつも互いに交換していないことに十分気をつけなければならない．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(q_1,\cdots,q_R;t)=H\left(q_1,\cdots,q_R;\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1},\cdots,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_R};t\right)\Psi(q_1,\cdots,q_R;t). \quad (29)$$

演算子 $H\left(q_1,\cdots,q_R;\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1},\cdots,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_R};t\right)$ は考えられている系の**ハミルトニアン**と呼ばれる.

ここに述べた対応の規則だけではシュレーディンガー方程式は一意的に定まらないということに注意するのはたいせつである．実際，あいまいの原因が二つある．

あいまいの原因の第一は，この規則が配置空間の座標変換に対して不変でないことによる．このことを説明するために簡単な例として，2次元空間内の自由粒子の例をとろう．デカルト座標によるハミルトン関数

$$\frac{p_x^2+p_y^2}{2m}$$

から出発すると，方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,y;t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Psi(x,y;t)$$

を得る．変数の変換を行なって極座標 (r,φ) に移ると，簡単な計算によって，この座標の関数とみなされた波動関数 $\Psi(r,\varphi;t)$ に対してつぎの方程式を得る：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\varphi;t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi(r,\varphi;t).$$

これに反して，極座標によるハミルトン関数

$$\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\varphi^2}{r^2}\right)$$

に直接対応の規則 (28) を適用すると，異なる方程式，すなわち

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\varphi;t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi(r,\varphi;t)$$

を得る．この型のあいまいさを避けるため，座標 q がデカルト座標でなければ規則 (28) を適用しないという規約を設ける[19].

あいまいさの原因の第二は，規則 (28) が普通の代数法則にしたがう量を，必ずしも互いに交換しない演算子に置き換えることによる．このため，同値な形式のハミルトン関数

---

(19) この規約はかってなものではない．これは座標軸の回転によってシュレーディンガー方程式の形が変わらないことを自動的に保証する．さらに，この制限を除き，共変的な形で対応の規則が定式化されるように，配置空間に適当な計量を入れ，(28) の演算子 $\partial/\partial q_r$ を適当な共変微分演算に置き換えることもできる．この問題については，L. BRILLOUIN, *Les Tenseurs en Mécanique et en Élasticité*, Masson, Ed., Paris, 1938, p. 200 を参照.

に，異なるハミルトニアンが対応することもありうる．たとえば（1次元の問題で）運動エネルギーの同値な表現

$$\frac{p^2}{2m} \quad と \quad \frac{1}{2m}\frac{1}{\sqrt{q}}\,pq\,p\,\frac{1}{\sqrt{q}}$$

に，それぞれ演算子

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} \quad と \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\sqrt{q}}\frac{\partial}{\partial q}\cdot q\cdot\frac{\partial}{\partial q}\cdot\frac{1}{\sqrt{q}}\right)\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial q^2}+\frac{1}{4q^2}\right)$$

が対応し，これらは量 $\hbar^2/8mq^2$ だけ違う．

古典力学との対応に基づくどんな規則も，このあいまいさを解決することができない，というのはその原因となっているのが演算子の非可換性であり，これはまた有限で0でないという $\hbar$ の性格に結びついているからである．それゆえ，経験的にハミルトン関数の形を詳しく定め，それから規則 (28) を適用することが必要である．実際的な興味のある場合はいつでも，つぎの規則にしたがわなければならない．

デカルト座標において，ハミルトン関数は，q と完全に独立な p の2次形式と，q だけに関係する関数と，時には $\sum_i p_i f_i(q_1, \cdots, q_R)$ という形の p の線形関数との和に等しい．ハミルトン関数をこの形にとってから，上の和の内の最後の項を，《対称化》された式 $(1/2)\sum_i [p_i f_i(q_1, \cdots, q_R)+f_i(q_1, \cdots, q_R)p_i]$ に置き換える．こうして得られた式に，対応規則 (28) を適用しなければならない．

p の線形項の《対称化》は，第4章で見るように，波動関数の統計的解釈の筋を通すために欠かせない条件なのである．電磁場のなかの1粒子の場合（方程式 (25) と (26)）は，この取り扱いをしなければならない系の一例である．

この節を終るにあたって，一つの応用を述べよう．電荷 Ze で質量 M の核と，電荷 $-e$ で質量 m の電子 Z 個とから成る複雑な原子に対して，シュレーディンガー方程式をつくってみる．ハミルトン関数は運動エネルギーの項 $Z+1$ 個と，核による Z 個の電子のクーロン引力の項 Z 個と，二つずつとった電子間相互のクーロン斥力の項 $Z(Z-1)/2$ 個とからつくられ，それは §9 の記号を使うと，

$$\frac{P^2}{2M}+\sum_{i=1}^{Z}\frac{p_i^2}{2m}-\sum_{i=1}^{Z}\frac{Ze^2}{|R-r_i|}+\sum_{i<j}\frac{e^2}{|r_i-r_j|}.$$

これからシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(R, r_1, \cdots, r_Z; t)$$
$$=\left(-\hbar^2\left(\frac{\triangle_R}{2M}+\sum_{i=1}^{Z}\frac{\triangle_i}{2m}\right)-\sum_{i=1}^{Z}\frac{Ze^2}{|R-r_i|}+\sum_{i<j}\frac{e^2}{|r_i-r_j|}\right)\Psi \qquad (30)$$

が導かれる．ここで，演算子 $\triangle_{R}$ は位置ベクトル $\boldsymbol{R}$ に関するラプラシアン，すなわち $\partial^2/\partial X^2+\partial^2/\partial Y^2+\partial^2/\partial Z^2$ であり，演算子 $\triangle_i$ は i 番目の電子の位置ベクトル $\boldsymbol{r}_i$ に関するラプラシアンである．

特に，水素原子の場合（$Z=1$）には，方程式は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}_p,\boldsymbol{r}_e;t)$$
$$=\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\triangle_p-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_e-\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_p-\boldsymbol{r}_e|}\right)\Psi(\boldsymbol{r}_p,\boldsymbol{r}_e;t) \tag{31}$$

と書かれる（ここで M は陽子の質量，$\boldsymbol{r}_p$ はその位置，$\boldsymbol{r}_e$ は電子の位置である）．第1近似として，陽子は無限に重いとみなし，水素原子をクーロン引力の場 $-e^2/r$ のなかの1電子のように取り扱うことができる．ここで $\boldsymbol{r}$ は，（動かないと仮定した）陽子のある場所に原点をとった座標系における電子の位置を表わす．電子の波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ はシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle-\frac{e^2}{r}\right)\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{32}$$

を満たす．

III. 時間を含まないシュレーディンガー方程式

§16. 定常解を求めること

一つの量子系のシュレーディンガー方程式は形式的に

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=H\Psi \tag{33}$$

と書かれる．ハミルトニアン H が直接には時間を含まないと仮定しよう．これは保存系の場合であって，エネルギーが運動の定数になっているような古典系に対応する．われわれははっきり決まったエネルギー E の力学的状態を表わす解 Ψ をつくってみよう．

このような波動 Ψ ははっきり決まった振動数，つまりアインシュタインの関係 $E=\hbar\omega$ によって与えられる振動数をもたなければならない．波の振動数と系のエネルギーとのあいだにあるこの関係は，物質波の理論の基本的要請になっていることを思い出そう．そこで Ψ は

$$\Psi=\phi\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{34}$$

という形になり，ϕ は配置空間の座標には関係するが時間を含まない．この式を方程式(33) に代入すると，方程式

$$H\psi = E\psi \tag{35}$$

が得られる．これは時間を含まないシュレーディンガー方程式と呼ばれる．

系が（34）のような波動によって表わされる状態にあるとき，それはエネルギーEの定常状態にあるといい，本当の波動関数は，時間を含まない波動関数ψと位相の因数 $e^{-iEt/\hbar}$ だけ違うけれども，ψ は普通よく定常状態の波動関数と呼ばれる．

§17. 方程式の一般的な特性．エネルギー・スペクトルの性質

説明を易しくするために特殊な例をとり，スカラー・ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかの質量 m の粒子について議論を進めよう．さらに $r \to \infty$ のとき $V(\boldsymbol{r}) \to 0$ であると仮定する．関数 ψ は粒子の位置を定めるベクトル $\boldsymbol{r}(x, y, z)$ の関数であり，時間を含まないシュレーディンガー方程式は

$$H\psi(\boldsymbol{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{36}$$

と書かれる．偏微分方程式の理論の言葉によると，方程式（36）のような方程式は**固有値方程式**と名づけられる．この方程式の解 $\psi_E(\boldsymbol{r})$ は，演算子 H の固有値 E に対応する**固有関数**と言われる．

実際にはこの固有値問題は，関数ψが満たさなければならない《正則性》の条件と境界条件とを明示しない限り，十分には定まらない．$\psi(\boldsymbol{r})$ に課せられる条件はもちろん波動関数に与えられる解釈と矛盾してはならない．第4章でまたこの点にもどるであろう．差し当たっては，$\psi(\boldsymbol{r})$ とその1階の偏導関数が全空間において連続で，滑らかかつ有界であることを要求しておく(*)．

このとき，つぎの結果が示される．これらをわれわれは認めることにするが，多くの例によって確かめる機会があるであろう．

a）$E < 0$ ならば，方程式（36）は，E のある特別な値に対してだけ解をもち，それらの値はとびとびのスペクトルをつくる．その値に対応する固有関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ —— または，固有関数がいくつか存在するときはその一つ一つ——は，無限遠で0になる．もっと正確に言えば，配置空間全体にわたる積分 $\int|\psi(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r}$ は収束する．統計的解釈によれば，無限遠にこの粒子を見いだす確率は0であって，それは事実上有界な範囲

(*) ［訳注］ ここで一応“滑らか”と訳したが，原文は uniform となっており，意味が不明である．ポテンシャルの特異点，あるいは不連続的に変化するところでは，ψ が滑らかでなくなったり，$\nabla\psi$ が不連続になるので，この要求は厳しすぎる．この問題はあとの例で論じられるので，ここでは一応，ψ はすなおな関数でなければならない，という程度に解釈しておけばよいと思う．

のなかに存在する．このような粒子は**束縛状態**にあるという．

b）$E>0$ ならば，方程式 (36) は E のどんな正の値に対しても解ける．正のエネルギーは**連続スペクトル**をつくるという．しかし対応する固有関数は無限遠で0にならない．その漸近的な挙動は，平面波 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ のそれと似ている．もっと正確に言えば，絶対値 $|\psi(\boldsymbol{r})|$ は $r\to\infty$ のとき0でない定数に近づくか，または限界値のあいだを限りなく振動し，その限界値の少なくとも一つは0でない．このような粒子は有界な範囲のなかに局在していない．この型の波動関数は衝突の問題を記述するのに役立つ．問題になっているのは**非束縛状態**あるいはまた衝突の定常状態といわれるものである．

われわれはこうして最初の基本的な結果を得た．すなわち束縛状態のエネルギーの量子化であり，これは古典理論の放棄をひき起こした事実のうちで最も目につく実験的事実の一つである．量子化されたエネルギーの決定は，ここで固有値を求める問題として現われた．この問題をできるだけ正確に解くことは波動力学の中心問題の一つである．いくつかの特に簡単な形のハミルトニアンに対しては，これを厳密に解くことができる．とりわけ水素原子の場合（詳しくは第11章で取り扱う）がそれであって，このエネルギー準位は演算子 $[-(\hbar^2/2m)\Delta-(e^2/r)]$ の固有値である．得られたスペクトルは前期量子論が予想したものと同じである．すでにわれわれはそれが実験と驚くほど一致することを強調しておいた．もっと複雑な状況の下では，適当な近似の方法に訴えなければならない．エネルギー・スペクトルがほどよい精度で計算された場合にはいつでも，非相対論的理論から期待しうる範囲で，実験結果と十分によく一致する．

固有解 ψ_E そのものも，ある程度まで実験的検証にかけることができる．実際，とびとびのスペクトルの固有関数は，いろいろの測定可能な量の計算，特に遷移確率の計算に入ってくる．連続スペクトルの固有関数については，その漸近的な形がきわめて直接に断面積という衝突現象に特有のパラメータに結びついているが，その正確な定義はのちに与えられよう．非相対論的原子物理学の領域では，現在までのところ，シュレーディンガー方程式の解によって計算した量と実験的に見いだされた値とのあいだに不一致が生じた例は一つもない．

演習と問題

1.　水素原子のボーアの円軌道に沿う電子の運動を観測するために，十分固いX線の照射によって電子の位置をつづけて何回か測ることを考えてみる．

X線光子との衝突によって電子に移る運動エネルギーの大きさ ΔT を，X線の波長 λ の

関数として表わせ．一つの軌道に沿う運動を観測するには，λ はこの軌道の半径よりずっと小さくなければならない．この場合に，乱れ ΔT を隣りのエネルギー準位との差と比較せよ．これから，ボーア軌道の観測可能性についてどんな結論がなされなければならないか．

2. 相対論的量子力学では，（静止）質量が m で速度が v の自由粒子の全エネルギー E と運動量 p はそれぞれ

$$E=\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}},\qquad p=\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

である．ハミルトン関数として $H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$ をとると，運動方程式はハミルトンの形で書かれることを確かめよ．

それから，この粒子の速度と，それに伴うド・ブロイ波の群速度 v_g とが等しいことを導け．この波動の位相速度 v_φ を計算せよ．それが速度 c より大きく，$v_g v_\varphi=c^2$ となることを示せ．

3. 2原子分子のなかの原子の運動についての古典的な記述の根拠を吟味せよ．そのために，原子が $kT/2$ の程度の平均運動エネルギーをもって，角振動数 ω の調和振動を行なうと仮定し，原子の平均波長とこの振動の振幅とをくらべる．まず常温における水素分子の場合を取り扱い，数値は $T=300°\,\mathrm{K}$, $kT=0.025\,\mathrm{eV}$, $\hbar\omega=0.5\,\mathrm{eV}$ とする．つぎに水素原子の200倍の質量をもつ重い原子から成る分子を，$300°\,\mathrm{K}$ と $10°\,\mathrm{K}$ のときに取り扱う．ただし，原子が受ける力は水素のときと同じであると仮定する．

4. 一つの電子が定磁場 $\mathcal{H}$ のなかで円軌道を描いている．この回転運動にド・ブロイの共鳴条件を適用せよ．電子の運動エネルギーが量子化されること，エネルギー準位が等間隔であること，準位の間隔は $(e\hbar/mc)\mathcal{H}$ に等しいことを示せ（この結果は，厳密な量子論による結果とくらべて，エネルギー準位が全体として $(e\hbar/2mc)\mathcal{H}$ だけ移動しているにすぎない）．10^4 ガウスの場に対して量子化軌道の半径，狭義の運動量，運動エネルギーを計算せよ．量子数1の軌道の半径を，水素原子の基底準位のボーア軌道の半径と比較せよ．

〔注意：この問題では運動量 $\boldsymbol{p}$ と狭義の運動量 $m\boldsymbol{v}$ とをはっきり区別せよ．$\boldsymbol{A}$ がベクトル・ポテンシャルで，これから磁場が導かれるとき，$\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}+(e/c)\boldsymbol{A}$ である．〕

5. どんな波も平面波の重ね合わせとみなされるという事実を使って，場のないときに，点 $\boldsymbol{r}_2$，時刻 t_2 における物質波 $\psi(\boldsymbol{r}_2,t_2)$ は時刻 t_1 において波動のとる値 $\psi(\boldsymbol{r}_1,t_1)$ から，つぎの演算によって導かれることを示せ：

$$\psi(\boldsymbol{r}_2,t_2)=\int K(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1\,;t_2-t_1)\,\psi(\boldsymbol{r}_1,t_1)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1. \tag{1}$$

ここで

$$K(\boldsymbol{\rho}\,;\tau)=(2\pi\hbar)^{-3}\int\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\rho}-E\tau)\right]\mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

であり，このなかの E は $\boldsymbol{p}$ の関数で，運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつ粒子のエネルギーに等しい．質量 m の非相対論的粒子に対しては

$$K(\boldsymbol{\rho}\,;\tau)=\mathrm{e}^{-3\pi\mathrm{i}/4}\left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{m\rho^2}{2\hbar\tau}\right)$$

であることを示せ．これから，点 $\boldsymbol{r}_2$，時刻 t_2 における波動関数を与える積分（1）に主として寄与する部分は，点 $\boldsymbol{r}_2$ のまわりの領域であって，その半径は

$$\left(\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

程度の大きさであることを導け．

6. 前問の方法を1次元の粒子に適用するにはどのように修正しなければならないか．この方法を利用して，時刻 $t=0$ における波動関数が

$$\psi(x,0)=(\pi\xi_0^2)^{-\frac{1}{4}}\exp(\mathrm{i}p_0x/\hbar)\exp(-x^2/2\xi_0^2)$$

であるような，質量 m の非相対論的自由粒子の，時刻 t における波動関数を決定せよ．時刻 $t=0$ におけるこの波動の強さ（絶対値の二乗）は，幅 ξ_0 のガウス分布である．これ以後のどの時刻においてもその形はガウス分布であること，しかしその幅は法則

$$\xi=\xi_0(1+(\hbar^2t^2/m^2\xi_0^4))^{\frac{1}{2}}$$

にしたがって増加する（波束の拡散）ことを示せ．

第3章　1次元の量子系

§1. 序　　説

量子論の解釈の問題に入るのに先立ち，シュレーディンガー方程式についてある程度の経験を積むために，1次元の系の波動力学を学ぼう．1次元の問題に興味があるのは，この簡単なモデルにより，もっと複雑な状態においてもう一度出てくるいくつかの性質が明らかにされるばかりでなく，これらの問題でさえ，ある適当な処理によって，1次元シュレーディンガー方程式と同じ型の方程式を解くことに帰着させることができるからである．

それゆえ，あるポテンシャル $V(x)$ のなかで，x 軸に沿って動くように束縛された質量 m の粒子の運動を調べてみる．そのシュレーディンガー方程式は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi(x,t) \tag{1}$$

である．われわれは特に定常状態を求めることに重点をおく．定常状態のエネルギーを E とすれば，

$$\Psi(x,t)=\phi(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{2}$$

となり，$\phi(x)$ は時間を含まないシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right)\phi=E\phi \tag{3}$$

の解である．本章を通じて記号

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2m}U(x),\qquad E=\frac{\hbar^2}{2m}\varepsilon \tag{4}$$

を使うことにする．これによって前の方程式を

$$\phi''+(\varepsilon-U(x))\phi=0 \tag{5}$$

という形に書き直す．これはスツルム＝リウヴィル型の微分方程式であり，全区間$(-\infty, +\infty)$ で有界，連続，微分可能なこの方程式の解を求めてみる．

このような解が存在するならば，この解の定数倍はいずれも同じ性質をもつ．それゆえ，定数倍だけしか違わない二つの解は，異なるものとはみなさないことにする．二つの線形独立な解が許される解であれば，その線形結合もすべてそうなる．このときこの固有

値は2重に**縮退**しているという．つまり縮退度は，線形独立な固有関数の個数として定義される．

方程式（5）は実である（$V(x)$ は x の実関数である）．ψ が固有関数ならば，その実部も虚部も固有関数である（固有値が縮退していなければ，〔独立な固有関数は一つしかないはずなので〕必ず一方が他方の定数倍になる）．それゆえ，与えられた固有値に関する固有関数を全部つくるためには，実固有関数を知りさえすればよい．この注意は計算をたいそう簡単にする．

以下第I節では，われわれはいくつかの階段型ポテンシャルの例について固有値問題を厳密に解く(*)．特に量子的運動と古典的運動との主な相違点，なかでも束縛状態のエネルギーの量子化，非束縛《粒子》の運動における波動の反射現象，共鳴現象とポテンシャル障壁透過現象を強調したい．第II節では任意のポテンシャル $U(x)$ に対する方程式（5）の体系的な研究を行なう．これによって第I節の特殊な場合に得られたいくつかの結果を，一般の場合に拡張することができる．

I．階段型ポテンシャル

§2. 概　　説

典型的な量子効果が現われるためには，ポテンシャル $V(x)$ が波長程度の大きさの距離のあいだでいちじるしい相対的変動を示すことが必要である．この条件に適する最も簡単な型のポテンシャルは**階段型ポテンシャル**である．これは何個かの点で第1種の不連続性(すなわち有限量だけ突然に飛躍すること）をもち，その他ではいたるところ定数であるようなポテンシャルである．x 軸はこれによりある個数 n の区間に分割され，その各区間でポテンシャルははっきり決まった定数値を保つ．

ポテンシャル $U(x)$ の第1種不連続性の存在は，関数 ψ に課せられた正則性の条件を破らない．事実，シュレーディンガー方程式

$$\psi'' = (U-\varepsilon)\psi$$

により，ポテンシャルの各不連続点において，U したがって ψ'' は有限量だけ突然に飛躍するが，ψ'' の積分はこれらの点でも連続である．それゆえ ψ' はいたるところ連続な関数であり，ψ はなおさらそうである．

(*)［訳注］ potentiel carré（英語 square potential）を，ここでは一応階段型ポテンシャルと訳した．原書では，このあとでもこの carré という形容詞をいちいちつけているが，訳文ではそのつど“角型”などと断るのはわずらわしいので大体において省略した．

さて，U_i を i 番目の領域における $U(x)$ の（定数）値とする（$i=1,2,\cdots,n$）．この領域における一般解は指数関数の線形結合である．しかしその挙動は（$\varepsilon-U_i$）が正であるか負であるかによって非常に違う．

$\varepsilon > U_i$ ならば，これは虚の指数関数

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_ix} \quad \text{と} \quad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_ix} \qquad (k_i=\sqrt{\varepsilon-U_i})$$

の結合，あるいは同じことであるが $\sin k_ix$ と $\cos k_ix$ の結合である．これは《振動的》な挙動を示す．

$\varepsilon < U_i$ ならば，これは実の指数関数

$$\mathrm{e}^{\kappa_ix} \quad \text{と} \quad \mathrm{e}^{-\kappa_ix} \qquad (\kappa_i=\sqrt{U_i-\varepsilon})$$

の結合である．この場合，解は《指数的》挙動を示すという．

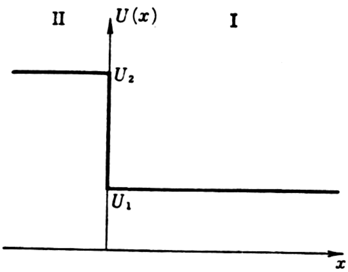
この微分方程式の一般解を表わすためには，これをポテンシャルが一定な n 個の領域ごとに（実または虚の）指数関数の線形結合の形で書き表わす．これらの結合の係数パラメータ（$2n$ 個）は，ポテンシャルの不連続点においてこの関数およびその導関数が連続であるという条件によって決められる．不連続点は（$n-1$）個あるから，この条件は $2(n-1)$ 個になる．こうして得られた一般解はそれゆえ予想されたとおり，二つの任意パラメータによって決まる．これが固有関数として許されるためには，全空間で有界であること，すなわち $x=+\infty$ および $x=-\infty$ とする極限においていずれも有界であることが必要である．全区間（$-\infty$，$+\infty$）でエネルギーがつねにポテンシャルより小さいならば，一般解はいたるところで指数的挙動を示すということに注意しよう．その第2階導関数はいつでもその関数自身と同符号である．これから容易にわかるように，この関数は極限 $-\infty$ と $+\infty$ の一方また両方において，指数関数のような増加を示す．それゆえ固有値問題は解をもたない．古典力学においても同様に，少なくとも区間の一部分でエネルギーがポテンシャルを越えなければ，可能な運動は存在しない．

ε が量 U_i の少なくとも一つより大きいとき，固有関数の存在およびその個数は本質的に，x 軸の両端 $+\infty$ と $-\infty$ における一般解の性格，すなわち指数的かあるいは振動的かということによって決まる．

§3. ポテンシャルの飛躍．波動の反射と透過

階段型ポテンシャルの最も簡単な例は，ポテンシャルが一回だけ突然に飛躍するもの（$n=2$）であり，そのポテンシャルは3·1図に示すように

$$U(x)=\begin{cases} U_1 & (x>0 \text{ のとき})\cdots\cdots\cdots\text{領域 I} \\ U_2 & (x<0 \text{ のとき})\cdots\cdots\cdots\text{領域 II} \end{cases}$$



3·1 図　ポテンシャルの飛躍

のようになる．考えをはっきりさせるために，$U_2 > U_1$ と仮定する．

二つの場合が起こりうる．

a）$U_2 > \varepsilon > U_1$.

一般解は領域 I ($x > 0$) では振動的挙動を，領域 II ($x < 0$) では指数的挙動を示す．それが固有関数として許されるためには，領域 II において $x \to -\infty$ のとき指数関数的に減少しなければならない．この条件に適する関数はつねにただ一つだけ存在する．それゆえこの区間に含まれる ε の値は，いずれも縮退しない固有値である．エネルギー・スペクトルは連続で縮退しない．この関数は二つの領域のおのおのにおいて

$$y = \begin{cases} A_1 \sin(k_1 x + \varphi) & (x > 0) \\ A_2 e^{\kappa_2 x} & (x < 0) \end{cases} \tag{6}$$

という一般形をとる．連続の条件によって y は一つの定数を除いて定まる．関数とその導関数の連続性を書き表わすよりも，むしろ関数とその対数導関数 y'/y の連続性を書き表わした方が便利である．対数導関数の連続性により位相 φ が決まる．つまり

$$k_1 \cot\varphi = \kappa_2$$

で，φ を $\varphi+\pi$ に変えることは A_1 の符号を変えることに相当するから，φ は π の倍数を除いて決められる．われわれは φ の値として

$$\varphi = \tan^{-1}\frac{k_1}{\kappa_2} \tag{6 a}$$

という値を採る．$\tan^{-1}$ は区間

$$\left(-\frac{\pi}{2},\ +\frac{\pi}{2}\right)$$

にある逆正接関数の主値である．関数の連続性から比 A_2/A_1 が決まる．すなわち

$$\frac{A_2}{A_1} = \sin\varphi = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2+\kappa_2^2}} = \sqrt{\frac{\varepsilon - U_1}{U_2 - U_1}}. \tag{6 b}$$

b）$\varepsilon > U_2$.

一般解は全空間で振動的挙動を示し，したがって許される固有関数となる．それゆえ ε の値のおのおのに，線形独立な二つの固有関数が対応する．固有値のスペクトルは連続でその縮退は2重である．

領域 II における挙動が $e^{-ik_2 x}$ になる固有関数をつくろう．これは一つの定数を除いて

定まるから，領域 I においてこの関数を表わす式の e^{-ik_1x} の係数を 1 に等しくとれば，さきの定数は決まる．

言いかえれば，

$$\chi = \begin{cases} e^{-ik_1x}+R\,e^{ik_1x} & (x>0) \\ S\,e^{-ik_2x} & (x<0) \end{cases} \tag{7}$$

とする．（本来は複素数の）定数 R と S は $x=0$ における連続の条件から決められる．対数導関数の連続性から

$$R = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} \tag{7a}$$

が得られ，関数の連続性から

$$S = 1+R = \frac{2k_1}{k_1+k_2} \tag{7b}$$

が得られる．

関数 χ^* は χ と線形独立な固有関数の一つである．それゆえ，固有値 ε に対応する固有関数はすべて χ と χ^* の線形結合の形に書かれる．

この状況を，系が古典的であった場合に得られる状況とくらべてみよう．このポテンシャルのなかの古典粒子の運動は，a）の場合であるか b）の場合であるかによって非常に違う．

a）の場合，古典運動はエネルギー $(\hbar^2/2m)\varepsilon$ をもつ粒子の運動であり，それは $+\infty$ から x 軸の正の部分に沿い一定の速さ $\hbar k_1/m$ で x の減少する向きに走り，点 $x=0$ で弾性的にはね返って，逆の向きに同じ速さで無限遠までひき返す．波動力学で類似の現象を実現するには，$y\,e^{-iEt/\hbar}$ に近いエネルギーをもつ波動から一つの波束をつくる必要がある．方程式（6）で与えられた関数よりは，この y を $i\,A_1\,e^{-i\varphi}/2$ で割って得られる波動

$$\psi_\varepsilon(x) = \begin{cases} e^{-ik_1x}-e^{i(k_1x+2\varphi)} & (x>0) \\ \dfrac{2A_2}{iA_1}\,e^{i\varphi}\,e^{\kappa_2 x} & (x<0) \end{cases} \tag{8}$$

を使う方が便利である．これに添数 ε をつけたのは，固有値 ε に対応する固有関数であることをはっきり示すためである．波束

$$\Psi(x,t) = \int_0^\infty f(k'_1-k_1)\,\psi_{\varepsilon'}(x)\,e^{-iE't/\hbar}\,dk'_1 \tag{9}$$

を考えよう．

関数 $f(k'_1-k_1)$ は k'_1 の実関数であり，十分に滑らかで，点 $k'_1=k_1$ においていちじ

るしいピークをもつものとする（記号の《ダッシュ》は今からしばらくのあいだxについての微分演算を意味しない．量 k'_1，ε'，E' の意味とそれらのあいだの関係は明らかである）．いろいろな面倒を避けるため，われわれはさらに $k_1'^2 > U_2-U_1$ のとき $f(k'_1-k_1)$ は0であると仮定する．$\Psi(x,t)$ はそれゆえ，a）の場合の固有関数に，それぞれの時間的変化を表わす指数関数 $e^{-iE't/\hbar}$ を掛けて重ね合わせたものである．そのつくり方そのものにより，Ψ は時間を含むシュレーディンガー方程式の解である．第2章の自由波束の研究を思い出せば，その時間的変化を知ることはやさしい．

領域Iでは，$\Psi(x,t)$ は二つの量の重ね合わせである：一つは《入射波束》

$$\Psi_i(x,t) = \int_0^\infty f(k'_1-k_1)e^{-ik'_1x}\,e^{-iE't/\hbar}\,dk'_1 \tag{10 a}$$

で，その中心 $x = -(1/\hbar)(dE/dk_1)t = -v_1t$ は速さ $v_1 = \hbar k_1/m$ で負の方向に移動し，時刻 $t=0$ に点 $x=0$ に達する．一つは《反射波束》

$$\Psi_r(x,t) = -\int_0^\infty f(k'_1-k_1)e^{i(k'_1x+2\varphi'-(E't/\hbar))}\,dk'_1 \tag{10 b}$$

で，その中心 $x = v_1t-2d\varphi/dk_1$ は速さ v_1 で逆の方向に移動し，原点を離れるのは時刻

$$\tau = \frac{2}{v_1}\frac{d\varphi}{dk_1} = 2\hbar\frac{d\varphi}{dE} \tag{11}$$

であって，《入射波束》の中心がここに到達する時刻 $t=0$ よりあとである．波束の中心の運動はそれゆえ古典粒子の運動とほとんど同じである．ただ一つの違いは，不連続点 $x=0$ で反射する際に波束の中心に生じる遅れ τ であって，古典粒子の方は瞬間的にはね返る．これに関連して，波束の中心の運動を考えるのは，波束の形がその運動の過程であまりひどく崩れないときにだけ意味があるということに注意しよう．入射波束に対してこれが言えるのは，中心が原点から波束の幅 Δx より大きい距離にあるあいだである．反射波束に対してこのことが同様に成り立つためには，その他に，関数 f のピークの幅 Δk が十分小さく，積分（9）に最も寄与する区間で φ に目立った変動がないこと，すなわち $\Delta k(d\varphi/dk_1) \ll 1$ であることが必要である．波束の空間的なひろがり Δx は $1/\Delta k$ 程度の大きさであるから，この条件はまた

$$\Delta x \gg \frac{d\varphi}{dk_1} \tag{12}$$

と書かれる．したがって $\Delta x/v_1 \gg \tau$．波束の幅は十分に広く，それが x 軸上の一点を通過するのに費す時間は，反射の際に起こる遅れよりずっと大きい．

遅れ τ のほかにも，古典粒子の運動と量子波束の反射とのあいだにもう一つの違いがある．波動 Ψ が区間IIでいつも0とは限らない．いま行なったばかりの考察と同じようにし

て，Ψ は $2A_2 e^{\kappa_2 x}/A_1$ と，時刻 $t=\tau/2$ の前後のある時間帯でのみ目立つ値をとるような一つの量との積に等しいことがわかる．この時間帯は，点 $x=0$ に置かれたポテンシャルの《壁》に向かって衝突する時間と解釈される．それゆえ，この時刻に領域IIのなかに粒子を見いだす確率は0でなく，また無視できる大きさでもないが，もしも古典粒子であったらこの領域のなかに侵入することはけっしてない．

今度は b) の場合を調べよう．この場合には，同じエネルギー[1]の値に対応する古典粒子の可能な運動が二つ存在する．一つは x 軸の全体，$+\infty$ から $-\infty$ までを走る粒子の運動である．その速さは，領域Iでは一定で $v_1=\hbar k_1/m$ に等しく，ポテンシャルの不連続点で突然 v_1 から $v_2=\hbar k_2/m$ に移り，それから $-\infty$ まで速度 v_2 で運動がつづけられる．もう一つの運動はちょうど反対に x 軸を正の向きに走る粒子の運動であって，その速さは領域IIで v_2，領域Iで v_1 である．

これらの古典運動を，同じ初期条件の下に起こる波束の運動とくらべよう．この比較を初めに述べたほうの運動（負の向きへの移動）について行なってみる．a) の場合と同じようにして，エネルギー ε の近くの値に対応する固有関数を重ね合わせることにより，方程式（9）の波束に似た波束をつくる．（7）の型の固有関数 χ がエネルギーによって決まることをはっきり示すために，χ に添数 ε をつける．本来は，関数 χ_ε と χ_ε^* とを重ね合わせて波束をつくるべきである．しかしわれわれの望む初期条件を実際に満たすためには，この先の議論からわかるように，関数 χ_ε だけを含まなければならない．そこで

$$\Psi(x,t)=\int_0^\infty f(k'_1-k_1)\,\chi_{\varepsilon'}(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E't/\hbar}\,\mathrm{d}k'_1$$

と書こう．（9）と違うところは，関数 f のピーク $k_1=\sqrt{\varepsilon-U_1}$ が a) の不等式に対応する範囲でなく，b) に対応する範囲のなかにあることだけである．波束の時間的な変化は波束（9）の場合と同じようにして得られ，結果はつぎのとおりである．初期条件が実際に満たされること，すなわち $t\ll 0$ のとき $\Psi(x,t)$ は領域IIにおいて事実上0であること，そして領域Iにおいては，$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}$ の項だけがいちじるしい寄与をすることが確かめられる．これから得られる波束は，中心 $x=-v_1t$ が古典粒子のように速さ v_1 で x の減少する方向に移動し，時刻 $t=0$ に原点に到達する．それから，$\Psi(x,t)$ は二つの波束に分かれ，一つは《透過波束》

$$\Psi_t(x,t)=\int_0^\infty f(k'_1-k_1)\,S'\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'_2x}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E't/\hbar}\,\mathrm{d}k'_1$$

---

[1] このことを，対応する量子論的問題において2重の縮退があることと比較されたい．

で，その中心 $x=-v_2t$ は厳密に古典粒子の運動をつづけ，もう一つは《反射波束》

$$\Psi_r(x,t)=\int_0^\infty f(k'_1-k_1)R'\,e^{ik'_1x}\,e^{-iE't/\hbar}\,dk'_1$$

で，その中心 $x=v_1t$ は，古典粒子が $x=0$ において弾性衝撃を受けたときのように動く．それゆえ，古典運動とのきわめて重大な違いが存在する：量子的《粒子》がポテンシャルの不連続点を通るとき，《反射》されるという確率が 0 でない．この分析をもっと進めるには，精密なしかたで確率を定義する必要がある．それは第4章でなされる．ここでは証明なしに，粒子を反射波のなかに見いだす確率は $|R|^2$ に等しく，透過波のなかに見いだす確率は $(k_2/k_1)|S|^2$ に等しいと指摘するだけで満足しよう（第4章の問題 2 を参照）．これら二つの量の和は1に等しい：

$$|R|^2+\frac{k_2}{k_1}|S|^2=1. \tag{13}$$

ゆえに，上の結果はつじつまがあっている．この等式は，(7 a) と (7 b) で与えられた値を代入することによって容易に確かめられる．

量

$$T=\frac{k_2}{k_1}|S|^2=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \tag{14}$$

は**透過率**と呼ばれ，透過現象の比重を量的に表わしている．これはエネルギーの増加関数であり，$\varepsilon\to\infty$ のとき1に近づく．この極限において古典力学の結果をもう一度見いだすことができる．

T が k_1 と k_2 の対称式であることに注意する．それゆえ同じエネルギーではあるが逆方向（領域IIからIへ）に伝わる波動も，同じ透過率をもつ；つまり透過率は進行の向きによらない．

これらすべての結果は，それが光波の伝播の問題とのあいだに示す大きな類似を考えれば，驚くべきことではない．ここで取り扱った問題は，光を吸収せず場所により屈折率の変化する媒質中の光の信号の伝播の問題と正確に同じである．a）の場合には，屈折率は点 $x=0$ において実の値（媒質I）から突然虚の値（媒質II）に移る．このときは全反射が生じる．b）の場合には，屈折率は実のままであり，媒質IとIIは単に異なる屈折率をもつにすぎない．屈折率の突然の変化によって必然的に一部の反射が生じる．

§4. 無限に高いポテンシャル障壁

前述の問題での極限の場合は，無限に高いポテンシャル障壁に出会った粒子の問題になる．考えを具体的にするために，$x<0$ のとき $U(x)=+\infty$ と仮定しよう．われわれに

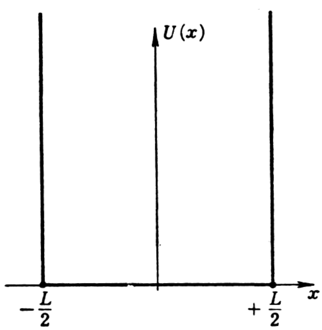
与えられた状況は，前の問題の a）の場合で $U_2 \to +\infty$ としたときに似ている．等式（6），(6 a)，(6 b) で与えられた波動関数 y がこの極限の場合（$\kappa_2 \to \infty$）にどうなるかを調べると，点 $x=0$ で0になることがわかる．

これは，領域 $x>0$ で関数 $V(x)$ がどんな形をしていても成り立つ一般的な結果なのである．事実，領域 $x<0$ において波動関数は必ず $Ae^{\kappa_2 x}$ という形をとり，その対数導関数はそれゆえ κ_2 である．ポテンシャル V_2 が無限大に近づく極限において，κ_2 もまた無限大になる．したがって，この関数は点 $x=0$ において無限大の対数微分係数をもたなければならない，あるいは同じことであるが，関数が0にならなければならない(*).

結論として，無限に高いポテンシャル障壁の端では，波動関数が0になる．

§5. 無限に深いポテンシャルの井戸．とびとびのスペクトル

第二の簡単な例として，無限に深いポテンシャルの井戸の場合を考えよう．エネルギーの基準として，井戸の底でポテンシャルがとる値を採用する．このポテンシャル0の範囲は x 軸のある区間 $(-L/2,\ +L/2)$ を占め，その両端は無限のポテンシャル障壁で限られている（3·2 図）.



3·2 図 無限に深い井戸

固有値問題は，2点 $+L/2,\ -L/2$ で0になり，区間 $(-L/2,\ +L/2)$ でシュレーディンガー方程式

$$\psi''+\varepsilon\psi=0$$

を満たす関数 ψ を求めることに帰着する．一般解は $\sin kx$ と $\cos kx$ $(k=\sqrt{\varepsilon})$ の線形結合である．境界における二つの条件を同時に満たす解が存在するのは，ε があるとびとびの値，すなわち

$$\varepsilon_n=\frac{n^2\pi^2}{L^2} \qquad (n=1,2,\cdots,\infty) \qquad (15)$$

（これに対する解は $kL=n\pi$）をとるときだけである．この固有値のおのおのに，ただ一つ限りの（縮退しない）固有関数が対応する．すなわち

$$n\text{ が奇数ならば}\qquad \psi_n=\cos\frac{n\pi}{L}x \qquad (16\text{ a})$$

$$n\text{ が偶数ならば}\qquad \psi_n=\sin\frac{n\pi}{L}x. \qquad (16\text{ b})$$

(*)［訳注］この部分はあまり納得できる証明とは言い難い．ポテンシャルが ∞ のところでは波動関数が0であることと，すべての領域にわたって波動関数が連続でなければならないことを使った方がわかりやすいと思う．

このきわめて簡単な結果は，一般的な性格をもついくつかの注意を呼び起こす．

第一に，今の結果は古典系を問題にしているときに得られる結果と深刻な相違がある．同じポテンシャルのなかで，古典粒子はそのエネルギーがいくらであっても正でありさえすれば，実際に運動することができる．それは区間 $(-L/2,\ +L/2)$ の両端にあるポテンシャルの二つの壁のあいだの（周期的）往復運動である．波動力学では，エネルギーのあるとびとびの値に対してしか運動が起こりえない(2)，つまりエネルギーは量子化されている．

第二の注意は固有関数の偶奇性(3)に関することである．n が奇数ならそれは偶関数であり（式（16 a）），n が偶数なら奇関数である（式（16 b））．固有関数が一定の偶奇性をもつという事実は，ポテンシャル $U(x)$ が原点のまわりの対称変換に対して不変であること

$$U(x) = U(-x)$$

による．偶奇性の問題は §14 でまったく一般的に論じられる．

最後の注意は固有関数の節の個数に関することである．定義によれば，節とは固有関数の零点である（ただし端点 $x = L/2$ と $x = -L/2$ に生じるものは除く）．節の個数はエネルギーの固有値とともに単調に増加し，一つの固有値からすぐ上の固有値に移ると一つだけ多くなる：基底状態の固有関数 ψ_1 は節をもたず，……，$(n-1)$ 番目の励起状態の固有関数 ψ_n は $(n-1)$ 個の節をもつ，など．この結果と振動する絃の定常状態の節の個数に関する結果との類似を強調することは有益である．実際，二つの問題は数学的に同じであるから，この類似は終りまで押し進められる．

§6. 有限な深さの井戸型ポテンシャル．共鳴

ポテンシャルの飛躍および無限に深い井戸の場合に得られた結果は，もっと複雑な場合にもまた見いだされる．新たな例として，3·3 図のポテンシャルを考える．ここで関数 $U(x)$ は

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & (x > a) \quad \cdots\cdots\cdots \text{領域 I} \\ U_2 & (a > x > b) \cdots\cdots\cdots \text{領域 II} \\ U_3 & (b > x) \quad \cdots\cdots\cdots \text{領域 III} \end{cases}$$

$$(U_2 < U_1 < U_3)$$

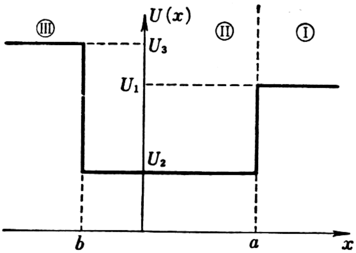
という形をとる．

---

(2) 古典的な意味での運動の周期はまた $h/\Delta E$ に等しい．ここで ΔE は対応原理により隣接する準位の差である．

(3) 関数 $f(x)$ は，$f(x) = f(-x)$ のとき偶関数，$f(x) = -f(-x)$ のとき奇関数である．

固有値問題は，定数 U_1, U_2, U_3 に対して ε がどんな値をとるかにより，異なる形になる．



3·3 図　有限な深さの井戸型ポテンシャル

a）$U_2 < \varepsilon < U_1$.　**とびとびのスペクトルと束縛状態.**

一般解は外側の領域Ⅰ とⅢで指数的な挙動を示し，内部の領域で振動的挙動を示す．固有関数として許されるためには，これが外側の二領域で $|x| \to \infty$ のとき指数関数的に減少しなければならない．領域Ⅰではただ一つだけ指数関数的に減少する解があり，領域Ⅲでもただ一つだけ指数関数的に減少する解がある．これら二つの解は，あるとびとびの ε の値に対してだけつながる．このことからエネルギー・スペクトルはとびとびであり，縮退していないことが結論される．

関数 ψ は実と考えてよい（66頁参照）から，三つの領域でそれぞれつぎのような形をとる．

$$\psi = \begin{cases} A_1\,\mathrm{e}^{-\kappa_1 x} & (x > a) \\ A_2 \sin(k_2 x + \varphi) & (a > x > b) \\ A_3\,\mathrm{e}^{\kappa_3 x} & (b > x). \end{cases} \tag{17}$$

位相 φ がわかれば，関数の連続性に関する二つの条件によって定数 A_1, A_2, A_3 が（一つの因数を除いて）定められる．φ については，これが対数導関数の連続性に関する二つの条件を同時に満たさなければならない．すなわち

$$k_2 \cot(k_2 a + \varphi) = -\kappa_1, \qquad k_2 \cot(k_2 b + \varphi) = \kappa_3 \tag{18}$$

言いかえれば

$$\begin{aligned} \varphi &= -k_2 a - \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_1} + n\pi \qquad (n \text{ は正の整数}), \\ \varphi &= -k_2 b + \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3} \end{aligned} \tag{19}$$

（φ は π の整数倍を除いて決められなければならない．われわれは区間 $(-\pi/2, +\pi/2)$ のなかに $k_2 b + \varphi$ をとることにより，この任意定数を固定した）．これが可能になるのは，あとの二つの方程式の右辺が等しいときであり，またそのときに限る．これらが実際に等しくなりうるのは，ε があるとびとびの値 ε_n，すなわち

$$n\pi - k_2(a-b) = \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_1} + \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3} \tag{20}$$

を満たす値をとるときだけである．つぎの記号

$$K = \sqrt{U_1 - U_2}, \quad L = a - b, \quad \cos\gamma = \sqrt{\frac{U_1 - U_2}{U_3 - U_2}} \quad \left(0 < \gamma < \frac{\pi}{2}\right)$$

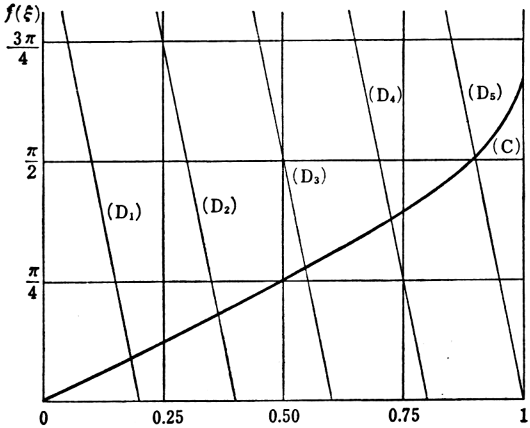
と，新しい変数

$$\xi = \frac{k_2}{K} = \sqrt{\frac{\varepsilon - U_2}{U_1 - U_2}}$$

とを導入しよう．方程式 (20) はまた ξ に関する条件の形で

$$n\pi - \xi KL = \sin^{-1}\xi + \sin^{-1}(\xi\cos\gamma)$$

と書かれる．この最後の方程式は3•4図によりグラフで解かれる．ε が U_2 から U_1 まで



3•4 図 とびとびの固有値をグラフで求めること：
$\xi = [(\varepsilon - U_2)/(U_1 - U_2)]^{1/2}$．固有値は方程式
$$f(\xi) = [\sin^{-1}\xi + \sin^{-1}(\xi\cos\gamma)]/\pi$$
のグラフ(C)と，方程式：$y(\xi) = n - (KL/\pi)\xi$ の各直線(D_n)との交点である ($\gamma = \pi/3$, $KL/\pi = 5$ にとってある)．

増すとき，ξ は0から1まで増し，右辺はグラフ (C) に沿って0から $\pi - \gamma$ まで増し（これはパラメータ γ だけによって決まる），左辺は線分 (D_n) に沿って $n\pi$ から $n\pi - KL$ まで減少する．(C) と (D_n) が交わるためには，整数 n が十分に小さく

$$KL \geqslant (n-1)\pi + \gamma$$

となることが必要十分である．$KL < \gamma$ のとき固有値はない．$\gamma \leqslant KL < \pi + \gamma$ のとき，固有値 ε_1 だけが存在する．$\pi + \gamma \leqslant KL < 2\pi + \gamma$ のとき，固有値は ε_1 と $\varepsilon_2 (\varepsilon_1 < \varepsilon_2)$ の二つだけである；以下同様．容易にわかるように，固有値はつねに n の増す順に並んでいる．それらはとびとびの有限数列をつくり，基底固有値 ε_1 から始まり，$1 + (KL - \gamma)/\pi$ 以下の最も大きい整数にあたる最大固有値で終る．

量子数 n はごくはっきりした数学的意味をもつ．式 (19) を検討すると，x が区間 (a,

b) を動くあいだに関数 $\sin(k_2x+\varphi)$ が $(n-1)$ 回 0 になることがわかる．一方，(17) によれば，この関数の零点は関数 ψ の零点である．したがって，n 番目の固有値 ε_n に対応する固有関数の節の個数は $n-1$ である．

終りに，われわれは，無限に深い井戸について行なったのと同様な方法で，古典的な状態との比較をすることができる．いまの場合，エネルギーの量子化に付け加えて，もう一つの違いに注意しなければならない．すなわち波動関数は領域 I と III のなかでも 0 でない有限の値をもつから，対応する古典粒子に対しては入ることが禁じられているこれらの領域のなかに，粒子を見いだす確率が 0 ではないのである．

b）$U_1<\varepsilon<U_3$．縮退しない連続スペクトル．波動の反射．

ここで取り扱う状況は，ポテンシャルの飛躍の問題における a）の場合に似ている．ε のおのおのの値に，いたるところで有界な関数がただ一つだけ対応し，その関数は領域 III で指数関数的に減少する．区間 (U_1, U_3) において固有値のスペクトルは連続で縮退がない．

われわれは

$$\psi=\begin{cases} e^{-ik_1x}+e^{i(k_1x+2\varphi_1)} & (x>a) \\ 2Ae^{i\varphi_1}\sin(k_2x+\varphi_2) & (a>x>b) \\ 2Be^{i\varphi_1}e^{\kappa_3x} & (b>x) \end{cases} \tag{21}$$

という形の解をつくってみる．今までの問題のように，対数導関数の連続の条件によって位相 φ_1 と φ_2 が決まる．それらは

$$\varphi_2=-k_2b+\tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3},\quad \varphi_1=-k_1a-\frac{\pi}{2}+\tan^{-1}\left(\frac{k_1}{k_2}\tan\left(k_2L+\tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3}\right)\right)$$

となり，関数の連続性から A と B を決めることができる．

今後は $U_3-\varepsilon\gg\varepsilon-U_2$ と仮定するが，このときには $k_2\ll\kappa_3$，そしてもちろん $k_1\ll\kappa_3$ が成り立つ．この場合，ちょうど領域 III が無限に強い斥力のポテンシャルによって占められており，したがって $B=0$ であるかのように，すべてのことが起こる．ここで考えるべき興味のある量は φ_1 と A^2 である．

便宜上 $a=0$, $b=-L$ とし，

$$\eta=\frac{k_1}{K}=\sqrt{\xi^2-1}$$

と置く．簡単な計算により

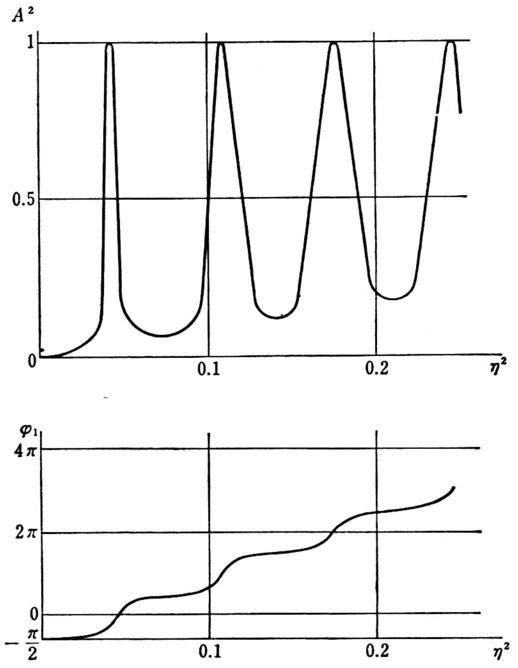
$$\varphi_1=\tan^{-1}\left(\frac{\eta}{\xi}\tan\xi KL\right)-\frac{\pi}{2},\qquad A^2=\frac{\eta^2}{\eta^2+\cos^2\xi KL}$$

となる．エネルギーが増すとき，位相 φ_1 は多かれ少なかれ規則的に増加し，一方，領域 II における波動の相対的な強さを示す量 A^2 は，端の値 $\eta^2/(1+\eta^2)$ と 1 とのあいだで振

動する．この振動は，KL が大きくなり η が小さくなるほどいちじるしくなる．そこで今後は

$$KL \gg \pi, \qquad \eta \ll 1$$

と仮定しよう．この場合 A^2 を η^2 の（すなわちエネルギーの）関数と考えると，そのグラフは一連の鋭いピークの列を示し，その幅は $4\eta/KL$ で，隣りあう二つの距離は $2\pi/KL$ である．3･5 図は，これらの近似条件の下での特徴ある A^2 と φ_1 の挙動を表わしている．



3･5 図　反射の共鳴．エネルギーの関数としての A^2 と φ_1 の変化（式 (21) を参照）．曲線は $KL=(b-a)\sqrt{U_1-U_2}=100$ のときのものである．エネルギーの目盛りは変数 $\eta^2=(\varepsilon-U_1)/(U_1-U_2)$ によって刻んである．

われわれはここで，典型的な波動現象である共鳴の現象に出会う．ある制限された(幅 $4\eta/KL$ の）範囲にあるエネルギーに対して，内部の領域の波動の強さが1または1の程度になる．この共鳴を起こすエネルギーの値は，$\varphi_2=(n+1/2)\pi$ となる場合に対応し，したがって領域IIは $(n+1/2)$ 個の《半波長》を含む．この共鳴の範囲外では強さは非常に小さい．

ポテンシャルの飛躍の問題のときのように，式（9）によって与えられたのと同じような波束と，古典粒子の運動とを，同じポテンシャルのなかでくらべることができる．古典粒子は $+\infty$ から一様な速さ $v_1=(\hbar K/m)\eta$ でやってきて，$x=0$ で突然加速され，領域 II を速さ $v_2=(\hbar K/m)\sqrt{1+\eta^2}$ で走り，$x=-L$ ではね返り，領域IIでは v_2 の速さ，そして領域 I では v_1 の速さで逆方向にもどってゆく．それが領域IIで過ごす時間は $\tau_{\text{cl.}}=2L/v_2$ である．波束の中心も，少なくともきわめて大きい x の範囲では，類似の運動を行なう．そこでは，波束がまだひどく変形していないので，中心の概念が意味をもっているからである．古典粒子のときと同じ運動が波束についても起こっているようにすべてのことが進行

するが，《領域IIで過ごす時間》は $\tau_{\mathrm{cl.}}$ でなく，$\tau=(2/v_1)\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}k_1=(2/v_1K)\mathrm{d}\varphi_1/\mathrm{d}\eta$ である．われわれはあえて詳しい吟味には立ち入らないけれども，すべての点で70頁のそれと同様である．議論に入ってくるいろいろな量の挙動をつぎの表に要約しておく：

入射エネルギー	φ_1	$\dfrac{\mathrm{d}\varphi_1}{\mathrm{d}k_1}$	$\dfrac{\tau}{\tau_{\mathrm{cl.}}}$	A^2
共鳴のとき	$n\pi$	L	$\dfrac{1}{\eta}$	1
二つの共鳴の中間のとき	$\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi$	$L\eta^2$	η	η^2

共鳴の中間では，A^2 がきわめて小さく，領域IIの滞在時間 τ が $\tau_{\mathrm{cl.}}$ にくらべてたいそう短い．波束は事実上領域IIに侵入しない．波は $x=0$ に着いたときほとんど全部反射される．これと同じ状況は光学にもあり，屈折率が突然大きく変わると，ほとんどつねに全反射がひき起こされる．共鳴のときはこれに反して $A^2=1$ であり，波は全部領域IIに侵入し，比較的長い時間，$\tau_{\mathrm{cl.}}$ よりもずっと長い時間，固まったままIIに滞在する．条件(12)によると，ここに得られたイメージが適用されるのは，領域II自身の幅よりもいちじるしく大きなひろがりをもつ波連のときだけであり（共鳴のとき $\mathrm{d}\varphi_1/\mathrm{d}k_1=L$），したがって $x=0$ にあるポテンシャルの飛躍を波が通り過ぎてしまうよりずっと前に，波束の先頭は反射点 $x=-L$ に到達する．ここで得られた効果は波動効果の典型であって，領域IIにおける入射波と反射波のあいだの干渉によるものである．

c）$\varepsilon>U_3$. 連続で縮退するスペクトル．波の反射と透過．

ここで取り扱う状況は，ポテンシャルの飛躍の問題における b）の場合の状況に似ている．ε の値の一つ一つに線形独立な二つの固有関数が対応する．区間 $(U_3,\ \infty)$ で固有値のスペクトルは連続であり，その値はすべて2重の縮退をもつ．

ポテンシャルの飛躍の問題のときと同様に，

$$\chi=\begin{cases} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}+R\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x} & (x>a) \\ P\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}+Q\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x} & (a>x>b) \\ S\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_3x} & (b>x) \end{cases} \qquad (22)$$

の形の固有関数をつくってみよう．点 $a,\ b$ における連続の条件によって $R,\ Q,\ P,\ S$ を決めることができる．計算の細部には入らないで，単に量 R と S に関する結果だけを示す．われわれはつぎの記号と規約を使う：

$$a=0,\quad b=-L,\quad K=\sqrt{U_1-U_2},\quad \xi=\frac{k_2}{K},\quad \eta=\frac{k_1}{K},\quad \zeta=\frac{k_3}{K}.$$

結果は

$$R = \frac{\xi(\eta-\zeta)\cos\xi KL + \mathrm{i}(\xi^2-\eta\zeta)\sin\xi KL}{\xi(\eta+\zeta)\cos\xi KL - \mathrm{i}(\xi^2+\eta\zeta)\sin\xi KL},$$

$$S = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\zeta KL}\frac{2\eta\xi}{\xi(\eta+\zeta)\cos\xi KL - \mathrm{i}(\xi^2+\eta\zeta)\sin\xi KL}.$$

この式によって，(22) の型の波およびそれに近いエネルギーをもつ波からつくられる波束の運動と，同じエネルギーをもつ古典粒子の運動とを同じポテンシャルのなかでくらべることができる．

入射波束は（領域 I で波動 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}$ からつくられ），領域 I を一様な速さ $v_1 = \hbar k_1/m$ で進み，領域 II に到達する．衝突が起こると，それは二つの束に分かれる．一つは反射波束で（領域 I の波 $R\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}$ から成り），速さ v_1 で $+\infty$ に向かって動き，もう一つは透過波束で（領域 III の波 $S\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_3x}$ から成り），速さ v_3 で $-\infty$ に向かって動く．古典粒子とは逆に，波動は一般に部分的にしか透過せず，われわれはポテンシャルの飛躍の場合に定めたように，透過率

$$T = \frac{k_3}{k_1}|S|^2 = \frac{4\eta\zeta\xi^2}{\xi^2(\eta+\zeta)^2\cos^2\xi KL + (\xi^2+\eta\zeta)^2\sin^2\xi KL} \tag{23}$$

を定義することができる．

ここでもまた，同じエネルギーに対する透過率は進行の向きによらない（T のなかに η と ζ が対称的に入っている）ことに注意する．さらに等式

$$|R|^2 + \frac{k_3}{k_1}|S|^2 = 1 \tag{24}$$

も確かめられる．

透過波に対する反射波の相対的な比重はエネルギーによって違い，われわれは b）の場合に見たのと同じ種類の共鳴現象を明らかにすることができる．特に

$$KL \gg \pi, \qquad \zeta < \eta \ll 1 \qquad （したがって\ \xi = 1）$$

のときにいちじるしい．このとき，(23) を調べればわかるように，透過率を η^2 の（すなわちエネルギーの）関数とみなすとき，たいていのところでは非常に小さく，$4\eta\zeta$ 程度の大きさであるが，ある一連の値に対して鋭い最大値を示し，それは $4\eta\zeta/(\eta+\zeta)^2$ に等しい．このピークの幅はおよそ $4(\eta+\zeta)/KL$ である．その位置は，領域 II が整数 n 個の《半波長》を含むとき，すなわち $\xi KL = n\pi$ が成り立つときのエネルギーによって決まる（それらの相互の距離はおよそ $2\pi/KL$ である）．

この吟味をつづけて，振幅 R と S の位相を考察し，透過波の《横断時間》や反射波の《反射時間》を定義し，古典粒子が領域 II を横断する時間とこれらの時間とを比較することもできる．われわれが到達する定性的なイメージはつぎのとおりである：共鳴のときは，波が領域 II だけにいる時間は古典的な時間よりはるかに長く（$(\eta+\zeta)^{-1}$ 倍長く），そのあとで透過波と反射波に分かれる．共鳴のとき以外，波は事実上領域 II に侵入することなく，領域 I と II の境界でほとんど全部反射され，それはほとんど瞬間的である（問題 1

を参照).

§7. ポテンシャル障壁の透過.《トンネル》効果

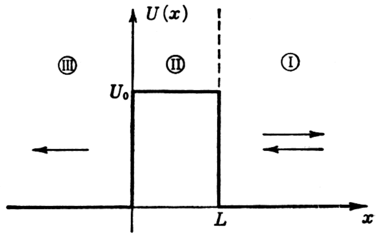
最後の例として，ポテンシャル障壁の透過の問題を調べよう (3·6 図).

$$U(x) = \begin{cases} 0 & (x > L) \quad \cdots\cdots\cdots \text{領域 I} \\ U_0(>0) & (0 < x < L) \cdots\cdots\cdots \text{領域 II} \\ 0 & (x < 0) \quad \cdots\cdots\cdots \text{領域 III} \end{cases}$$

この場合は ε の正の値はすべて 2 重に縮退した固有値である. ε が U_0 より大きいか小さいかによって二つの場合が現われる. どちらの場合にも，領域IIIで負の向きに伝わる波を表わすような解，すなわち

$$e^{-i\sqrt{\varepsilon}x} + R\,e^{+i\sqrt{\varepsilon}x} \qquad (x > L)$$
$$S\,e^{-i\sqrt{\varepsilon}x} \qquad (x < 0)$$

という形の解をつくってみる.



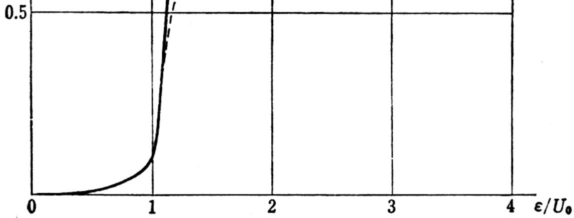
3·6 図　ポテンシャル障壁

領域IIにおけるその挙動は

$$\varepsilon < U_0 \text{ のとき指数的：} A\,e^{\kappa x} + B\,e^{-\kappa x} \qquad (\kappa = \sqrt{U_0 - \varepsilon})$$
$$\varepsilon > U_0 \text{ のとき正弦的：} C\,e^{ikx} + D\,e^{-ikx} \qquad (k = \sqrt{\varepsilon - U_0})$$

である.

ここでは透過率の計算結果を示すだけにしよう (3·7 図).



3·7 図　障壁を横切る透過率をエネルギーの関数としたときの変動 (3·6 図の障壁). $U_0L^2 = 40$ にとってある.

$$T = |S|^2 = \begin{cases} \dfrac{4\varepsilon(\varepsilon-U_0)}{4\varepsilon(\varepsilon-U_0)+U_0^2\sin^2 kL} & (\varepsilon > U_0), \\ \dfrac{4\varepsilon(U_0-\varepsilon)}{4\varepsilon(U_0-\varepsilon)+U_0^2\sinh^2 \kappa L} & (\varepsilon < U_0). \end{cases}$$

前の§3—§6のように，上の形の波動関数からつくった（9）の型の波束の運動と，$+\infty$からやってくる同じエネルギーの古典粒子の運動とを比較することができる．

最も驚くべき相違は $\varepsilon < U_0$ のときに生じる．古典粒子は障壁ではね返り，これを横切ることはできない．波束は反射束と透過束に分かれ，その強さはけっして0ではない．ε が0から U_0 まで増すとき，透過率は0から $[1+U_0L^2/4]^{-1}$ という値まで単調に増加する．この効果は**トンネル効果**と呼ばれ，α 放射能の理論で重要な役割を演じる．それは障壁が低くそして薄くなるほどいっそう重要になる．

$\varepsilon > U_0$ のときは，古典粒子は領域IIで速度を落とすけれどもこれを横切り，領域IIIを進んで $-\infty$ に向かう．波束はこれに反して，少なくとも部分的にはいつも反射される．完全な透過（$T=1$）が起こるのは，kL を π の倍数にする値をエネルギーがとったときだけである．エネルギーが増すにつれて，透過率はこの最大値と，$4\varepsilon(\varepsilon-U_0)/(2\varepsilon-U_0)^2$ 程度の大きさの最小値のあいだを振動する．この効果は障壁が非常に大きいかまたは非常に厚く，領域IIにおける運動エネルギー $\varepsilon-U_0$ が小さいとき特に顕著である．前の§6で論じた共鳴現象との相似に注意されたい（問題2を参照）．

II．1次元のシュレーディンガー方程式の一般的性質

§8．ロンスキアンの性質

方程式

$$y''+[\varepsilon-U(x)]y = 0 \tag{25}$$

にもどろう．われわれはこの固有値方程式の一般的性質をいくつか述べようと思う．今後はずっと，実関数 $U(x)$ につける制限は，下に有界であることと，全区間（$-\infty$, $+\infty$）において第1種の不連続点しかもたないということだけにしておく．

これらの性質の多くは二つの解のロンスキアンに関する重要な定理からただちに導かれる．今後はこれを**ロンスキアン定理**と呼ぼう．

二つの関数 y_1, y_2 のロンスキアンとは，式

$$W(y_1, y_2) = y_1y'_2 - y_2y'_1$$

のことをいう．これは y_1 と y_2 について双1次であり，これら二つの関数の交換に対して反対称である．x 軸上の一点でこれが0になるならば，y_1 と y_2 とはこの点で同じ対数変化率をもつ．全区間（$-\infty$, $+\infty$）でこれが0になるならば，二つの関数は，一方が他

方の定数倍になる.

ロンスキアン定理. 関数 $F_1(x)$ と $F_2(x)$ が区間 (a, b) において連続である——または第1種の不連続点しかもたない——とするとき, z_1 と z_2 とがこの区間においてそれぞれ方程式

$$z_1''+F_1(x)\,z_1 = 0 \tag{25'}$$

$$z_2''+F_2(x)\,z_2 = 0 \tag{25''}$$

の解であるならば, 区間の両端におけるロンスキアンの差は式

$$W(z_1, z_2)\Big|_a^b = \int_a^b [F_1(x)-F_2(x)]\,z_1 z_2\,\mathrm{d}x \tag{26}$$

によって与えられる.

この定理を証明するために, (25′) に z_2 を掛け, (25″) に z_1 を掛けて両辺を引く. そうすると

$$[z_2 z_1''-z_1 z_2'']+(F_1-F_2)\,z_1 z_2 = 0.$$

第1項は, 符号を除いて, ロンスキアン $W(z_1,\ z_2)$ の x に関する導関数である. 区間 (a, b) で項ごとに積分して, 関係式 (26) を得る.　(証明終)

この定理において, 方程式 (25′) と (25″) が (5) の型の方程式であり, 同じ形のポテンシャル $U(x)$ と決まった値のエネルギー ε に対応するときは, われわれにとって特に興味がある. このときは三つの重要な系が導かれる:

系 I. y_1 と y_2 とがそれぞれ定数 ε の値 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ に対応する方程式 (5) の解ならば, これらの解が定義されている区間に属する任意の値 $a,\ b$ に対して,

$$W(y_1, y_2)\Big|_a^b = (\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int_a^b y_1 y_2\,\mathrm{d}x \tag{27}$$

が成り立つ.

系 II. y と z とが同じ ε の値に対応する方程式 (5) の二つの解ならば, そのロンスキアンは x に無関係である:

$$W(y, z) = 定数.$$

系 III. $Y(x\,;\varepsilon)$ は方程式 (5) の解であり, x 軸上の1点 a において (x に関する) 対数変化率が決まった値 f_a をとるものとし, $f(x\,;\varepsilon)$ を軸上の点 x における対数変化率とする. ε の関数とみなすとき, $f(x\,;\varepsilon)$ はこの変数に関して単調関数であり, $x<a$ のとき増加, $x>a$ のとき減少で, その導関数は

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{Y^2(x\,;\varepsilon)}\int_a^x Y^2(\xi\,;\varepsilon)\,\mathrm{d}\xi. \tag{28}$$

〔ε の関数として，$f(x\,;\varepsilon)$ は tan または cot に似た挙動を示し，$Y(x)$ が0になるところでは垂直な漸近線をもつ.〕

系IとIIはロンスキアン定理の直接の応用である．系IIIの証明はつぎのとおりである．ε を固定すれば，x 軸上の与えられた点 $x=a$ における方程式（5）の解の値と，その導関数の値を指定するとき，解は完全に決められる．$Y(x\,;\varepsilon)$ をこの特殊解とし，

$$Y(a\,;\varepsilon) = y_a, \qquad Y'(a\,;\varepsilon) = y'_a$$

と置く．端点におけるこの条件を一定に保ちながら ε を変化させると，$Y(x\,;\varepsilon)$ は ε(および x) のある連続関数になる．限りなく近い二つの値 ε, $\varepsilon+\delta\varepsilon$ に対して，限りなく近い二つの式 Y, $Y+\delta Y$ が対応する．系Iを区間 $(a,\ b)$ でこれらに適用すると，

$$W(Y, Y+\delta Y)\Big|_a^b = -\delta\varepsilon\int_a^b Y^2\,\mathrm{d}x.$$

仮定により，$x=a$ では $W(Y, Y+\delta Y)=0$. その他の x の値に対してはつねに，

$$W(Y, Y+\delta Y) = W(Y, \delta Y) = Y\,\delta Y' - Y'\,\delta Y = Y^2\,\delta\left(\frac{Y'}{Y}\right) = Y^2\,\delta f.$$

ここで $f=Y'/Y$ と置いてある．対数導関数 f も Y と同じく，ε と x の連続関数である．上の式から

$$-Y^2\,\delta f\Big|_{x=b} = \delta\varepsilon\int_a^b Y^2\,\mathrm{d}x.$$

書き直せば

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\Big|_{x=b} = -\frac{1}{Y^2(b)}\int_a^b Y^2(x)\,\mathrm{d}x. \qquad \text{(証明終)}$$

これら三つの系によって示されたシュレーディンガー方程式の解の性質は，ポテンシャル $U(x)$ の特別な形に無関係であるという点で，たいそう興味深い．

§9. 解の漸近的な挙動

方程式（5）の一般解の区間（$-\infty$, $+\infty$）の端における漸近式は，x がこれらの極限へゆくとき $\varepsilon-U$ が正であるか負であるかによって非常に違う．ここでは極限 $x=+\infty$ における漸近式を調べよう．結論は極限 $x=-\infty$ に対しても同じようにあてはまる．そこで，x がある値 x_0 を越えれば $\varepsilon-U(x)$ は定符号を保つと仮定する．二つの場合が起こりうる．

<u>第一の場合：$x>x_0$ で $\varepsilon>U(x)$.</u>

$x\to\infty$ のとき $U(x)$ が単調に有限な極限 U_+ に近づくことを——実際の場合はいつもそうであるが——仮定する.

$$k=\sqrt{\varepsilon-U_+}$$

と置く. われわれが示そうとするのは, $x\to\infty$ のときに

——方程式 (5) の実の解は有界であって, 二つの相対する数のあいだを限りなく振動する.

——さらに $U(x)$ が U_+ に $1/x$ より速く近づけば,

$$y \underset{x\to\infty}{\sim} A_+\sin(kx+\varphi_+) \tag{29}$$

ということである. ここに, A_+ と φ_+ は適当な実の定数である.

このために, 方程式 (5) は方程式 $z''+k^2z=0$ に《漸近収束》し, この一般解は $A\sin(kx+\varphi)$ であって, 二つの任意定数 A と φ によって決まることに注意する. y の漸近式を決めるために,

$$y=A\sin(kx+\varphi),\qquad y'=Ak\cos(kx+\varphi) \tag{30}$$

によって定められる関数 $A(x)$ と $\varphi(x)$ を導入する (定数変化法). 方程式 (5) は1階の微分方程式

$$\frac{A'}{A}=\frac{U-U_+}{2k}\sin 2(kx+\varphi),\qquad \varphi'=-\frac{U-U_+}{k}\sin^2(kx+\varphi)$$

と同値である. これを積分して

$$A(x)=A(x_0)\exp\left\{\int_{x_0}^{x}\frac{U(\xi)-U_+}{2k}\sin 2[k\xi+\varphi(\xi)]\,\mathrm{d}\xi\right\}, \tag{31}$$

$$\varphi(x)=\varphi(x_0)-\int_{x_0}^{x}\frac{U(\xi)-U_+}{k}\sin^2[k\xi+\varphi(\xi)]\,\mathrm{d}\xi. \tag{32}$$

(31) の右辺の積分は確かに収束する. $A(x)$ は $x\to\infty$ のとき有限の極限 A_+ に近づく. さらに, $\varphi'\to 0$ であるから, y の式 (30) のなかの関数 $\sin(kx+\varphi)$ は振動し, その周期は漸近的に $2\pi/k$ に近づく. これで初めに述べた結果は示された. さらに $1/x$ より速く $U(x)$ が U_+ に近づくと(*), (32) の右辺の積も収束する. A と φ もそれぞれ有限な極限 A_+ と φ_+ に近づき, したがって漸近式 (29) が成り立つ. (証明終)

<u>第二の場合 : $x>x_0$ のとき $\varepsilon<U(x)$.</u>

今から得られる結果は無限遠における $U(x)$ の挙動に関係しない. われわれは単に

$$x>x_0 \text{ のとき } U(x)-\varepsilon\geqslant M^2>0$$

(*) [訳注] この言い方はすこし不正確である. 正しく言うと,

$$U-U_+=o\left(\frac{1}{x}\right) \text{ ではだめで, } U-U_+=O\left(\frac{1}{x^{1+\varepsilon}}\right) \text{ ならよい } (\varepsilon>0).$$

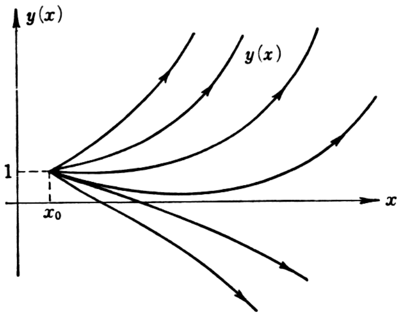
ということだけを仮定する．この場合は，階段型のポテンシャルの問題において指数的挙動を示す解に相当する．

われわれが示そうとするのは，$x \to \infty$ のとき

——少なくとも e^{-Mx} と同じ速さで0に近づく（5）の特殊解が一つ存在し（一つの定数を除けば定まる）；

——他のすべての解は，やはり少なくとも e^{Mx} と同じ速さで ∞ に近づく．

解は一つの定数を除いて定められるから，条件 $y(x_0)=1$ によってこの定数を固定し，この規格化の条件を満たす解の挙動を調べよう．それらのうちのいくつかは3·8図のグラフに示される．



3·8 図 $x > x_0$ に対して $U(x)-\varepsilon \geqslant M^2 > 0$ であるとき，規格化の条件 $y(x_0) = 1$ を満たす方程式（5）の解をいくつか示す．

特殊解 $Y(x)$ と $Z(x)$ をそれぞれ端の条件

$$Y(x_0)=1,\quad Y'(x_0)=0,$$

および $$Z(x_0)=0,\quad Z'(x_0)=1$$

によって定めると，問題の解は

$$y(x) = Y(x)+fZ(x) \qquad (33)$$

の形になる．パラメータ $f = y'(x_0)$ は $-\infty$ と $+\infty$ のあいだのすべての値をとることができる．

$Y(x)$ と $Z(x)$ は区間 (x_0, ∞) でつねに正であり，少なくとも e^{Mx} の速さで無限大に近づく．実際，方程式（5）の他の解と同様に，これらの関数はその第2階導関数といつも同じ符号をもつ．このことから，初期条件をすこし調べてみれば，これらは上に凹に限りなく増加しなければならないことが導かれる．この増加の速さを評価するには，$Y'' \geqslant M^2 Y$ と $Z'' \geqslant M^2 Z$ に注意し，x_0 において同じ初期条件を満たす微分方程式 $u''-M^2 u=0$ の解，すなわち $\cosh M(x-x_0)$ および $\sinh M(x-x_0)$ と，関数 Y および Z をそれぞれ比較する．Y と Z の方がどこでもこれらの比較関数より大きい（または等しい）．事実，ロンスキアン定理を適用すると，

$$W(Y,\ \cosh M(x-x_0)) \leqslant 0$$

となり，したがって
$$\frac{Y'}{Y} \geqslant M \tanh M(x-x_0),$$

積分して
$$Y \geqslant \cosh M(x-x_0).$$

同様にして $Z \geqslant \sinh M(x-x_0)$ が示される．ついでながら

$$Y' \geqslant MY \tanh M(x-x_0)$$

に注意すると，無限遠で $Y' \geqslant MY$；同様にして，無限遠で $Z' \geqslant MZ$.

一方（系II），

$$\text{任意の } x \text{ に対して} \qquad Z'Y - Y'Z = 1. \tag{34}$$

関数

$$u(x) \equiv \frac{Y}{Z}, \qquad v(x) \equiv \frac{Y'}{Z'}$$

を導入しよう．性質（34）と，Y および Z が方程式（5）の解であるということから，つぎの結果を得る：

$$u-v \equiv \frac{Y}{Z} - \frac{Y'}{Z'} = \frac{1}{ZZ'}, \tag{35}$$

$$u' = \frac{Y'Z - YZ'}{Z^2} = -\frac{1}{Z^2}, \qquad v' = \frac{Y''Z' - Y'Z''}{Z'^2} = \frac{U-\varepsilon}{Z'^2}.$$

区間（x_0, ∞）で u は減少関数，v は増加関数で，その差は無限遠で0になる．それゆえこれらは $x \to \infty$ のとき（正の）共通の極限 C をもち，

$$v(x) < C < u(x)$$

が成り立つ．（35）を使って，この不等式は

$$-\frac{1}{ZZ'} < v - C < 0 < u - C < \frac{1}{ZZ'} \tag{36}$$

と書き直される．特殊解

$$\hat{y}(x) \equiv Y - CZ = (u(x) - C)Z(x)$$

とその導関数

$$\hat{y}'(x) \equiv Y' - CZ' = (v(x) - C)Z'(x)$$

はつねに不等式

$$-\frac{1}{Z} < \hat{y}' < 0 < \hat{y} < \frac{1}{Z'}$$

を満たす．それゆえいたるところ正の関数 $\hat{y}$ は，少なくとも $1/Z'$ の速さで0に近づくから，もちろん少なくとも e^{-Mx} の速さで0に近づく．同様にして，いたるところ負の関数 $\hat{y}$ も，少なくとも e^{-Mx} の速さで0に近づく．解 $\hat{y}$ は無限遠で0になり，われわれの求めるものである．

明らかにこれ以外の解はない．なぜならば，$f \neq -C$ とすると，解 $y(x)$ はまた

$$y = \hat{y} + (f+C)Z$$

と書かれ，その漸近的挙動は，0でない因数 $f+C$ を除いて，Z と同じになるからである．

（証明終）

§10. 固有値スペクトルの性質

x が $+\infty$ および $-\infty$ に近づくときの $U(x)$ の極限をそれぞれ U_+, U_- とする．これらの一方または両方を $+\infty$ に置き換えても，以下の議論は成り立つ．U_+ と U_- により ε の変域は三つの範囲に分けられ，そのなかで固有値スペクトルは異なる形で現われる．考えを決めるために $U_+ < U_-$ と仮定しよう．

$\varepsilon > U_-$ の範囲では，$\varepsilon - U(x)$ が区間 $(-\infty, +\infty)$ の両端で正の値を保つ．方程式（5）の解は $x \to \pm\infty$ のとき有界であるから，すべて固有関数として許される．ε は2重の縮退をもつ固有値である．固有値スペクトルは連続で縮退している．一方，二つの漸近領域において，固有関数は有限で相対する上下限のあいだで限りなく振動する．それは非束縛状態を表わす．

$U_- > \varepsilon > U_+$ の範囲では，$\varepsilon - U(x)$ が極限 $x = -\infty$ で負になるから，この漸近領域でただ一つの有界な（指数関数的に減少する）解が存在する．もう一つの漸近領域では，$\varepsilon - U(x)$ が正であるから，この解はやはり有界で限りなく振動する．それゆえこの解は固有関数として許され，非束縛状態を表わす．固有値スペクトルは連続で縮退はない．

$U_+ > \varepsilon$ のときは，$\varepsilon - U(x)$ が両方の漸近領域で負になる．有界な解は，もしそれが存在すれば，区間の両端で（指数関数的に）0となり，束縛状態を表わす．しかしそれが存在するのは，あるとびとびの ε の値に対してだけである．実際，$\hat{y}_-$ を一端 $-\infty$ で0になる解，$\hat{y}_+$ を他端 $+\infty$ で0になる解とし，x 軸上の決まった一点におけるその対数変化率をそれぞれ f_-, f_+ とする．ε が固有値になるのは，$\hat{y}_-$ と $\hat{y}_+$ が（定数因数を除いて）等しいとき，すなわち $f_- = f_+$ のときであり，またそのときに限る．ε の関数と考えれば，f_- は単調減少関数であり，f_+ は単調増加関数である（系III[4]）．これらは，一つ一つ孤立したいくつかの ε の値に対してだけ等しくなりうる．スペクトルはとびとびで縮退はない．

とびとびのスペクトルの固有値の個数は，関数 $U(x)$ の形によってきわめて幅広く変わる．それは0から ∞ まで動きうる．$U(x)$ が，二つの漸近値のうちの小さい方 U_+ よりもいたるところで大きければ，個数は確かに0である．そうでないとすると，個数は

$$\frac{1}{\pi}\int\sqrt{U_+ - U(x)}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\pi}\int\frac{\sqrt{2m(V_+ - V(x))}}{\hbar}\,\mathrm{d}x$$

の程度の大きさであること――ここではそれを認めることにする――が示される．この積

(4) 実際には，$a = +\infty$ または $-\infty$ の場合に系IIIを拡張したものが問題になる．容易にわかるように，関数 $Y(x;\varepsilon)$ の定数にわずかな変更を加えれば，この系はそのまま成り立つ．$Y(x;\varepsilon)$ は点 $a(=\pm\infty)$ で0になる（そしてその導関数も0になる）ような方程式（5）の解である．ε のある値に対しては f_- と f_+ が垂直な漸近線をもつことがあるのに注意せよ．

分の範囲は，$U(x) < U_+$ となるような x 軸上の全領域である．特に，この積分が発散すると，固有値の個数は無限になる．

§11. 非束縛状態：波の反射と透過

二重に縮退した連続スペクトルの部分における固有関数によって，一部はポテンシャル $U(x)$ を透過し一部は反射するような波束の運動を表わすことができる．いろいろな紛糾を避けるために，$U(x)$ は漸近値 U_+ と U_- に $1/x$ よりも速く近づくと仮定しよう．そうすると実の固有関数に対して漸近式 (29) を利用することができる．

二つの型の固有関数によって，われわれが考えたい波束をつくることができる．第一の型の関数 $u(x)$ は，二つの漸近区域における挙動が，

$$u \underset{x\to-\infty}{\sim} e^{ik_-x}+R_u e^{-ik_-x}, \qquad u \underset{x\to+\infty}{\sim} S_u e^{ik_+x} \qquad (k_\pm=\sqrt{\varepsilon-U_\pm})$$

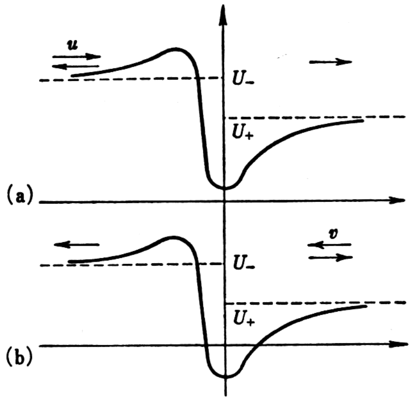
となるものである．(9) の場合と同じように，近いエネルギーに対応する関数を重ね合わせて波束をつくると，$-\infty$ から正の方向に進行する入射波 e^{ik_-x} が表わされ，それがポテンシャル $U(x)$ に達するとそこで二つに分かれ，一つは反射波 $R_u e^{-ik_-x}$ で逆の向きに進み，もう一つは透過波 $S_u e^{ik_+x}$ で $+\infty$ に向かって伝わる (3·9 図 a)．

第二の型の関数 $v(x)$ は，その挙動が

$$v \underset{x\to-\infty}{\sim} S_v e^{-ik_-x}, \qquad v \underset{x\to+\infty}{\sim} e^{-ik_+x}+R_v e^{ik_+x}$$

となるもので，これによって反対の向きに移動する同じような波束を表わすことができる (3.9 図 b)．

関数 u, v とその複素共役 u^*, v^* は同じシュレーディンガー方程式の解である．これらのうちの二つからつくられるロンスキアンを考えよう．それは x に無関係である(系II)．二つの漸近領域でこれが同じ値をとることを書き下すと，係数 R_u, S_u, R_v, S_v とその共役複素数とのあいだの関係が得られる．関数 u, v, u^*, v^* から異なる二つの組を選べるだけこの種の関係が存在する．すなわち全部で六つの関係があり，これらは関数 $U(x)$ の特殊な形によらない．



3·9 図 ポテンシャルによる波の反射と透過
a) u 型の解——波は負の x から来る．
b) v 型の解——波は正の x から来る．

こうして得られるのは[5]

$$\frac{\mathrm{i}}{2}W(u,u^*) = \quad k_-[1-|R_u|^2] = \quad k_+|S_u|^2 \tag{37}$$

$$\frac{\mathrm{i}}{2}W(v,v^*) = -k_-|S_v|^2 \quad = -k_+[1-|R_v|^2] \tag{38}$$

$$\frac{\mathrm{i}}{2}W(u,v) = \quad k_-S_v \quad = \quad k_+S_u \tag{39}$$

$$\frac{\mathrm{i}}{2}W(u,v^*) = -k_-R_uS_v^* \quad = \quad k_+S_uR_v^* \tag{40}$$

と，終りの二つの両辺の共役複素数を等しいと置いて得られる二つの関係である．

(37) と (38) は流束不変の関係と呼ばれる．特別な場合については，すでにこれらを確かめてある ((13) と (24))．この命名の起こりは，漸近区域における非束縛状態の波動関数に与えられるつぎのような解釈によるものである．この解釈については，衝突の問題を論じるときに，その根拠を調べる（第10章）．漸近区域のうちの一つ，たとえば $-\infty$ における波動関数 ψ の式を $A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ とする．この波動関数から，(9) の場合と同様にして一つの波束をつくると，それは二つの項から成る．一つは $A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ からつくられ，相対的な強さ $|A|^2$ の項であり，x の増す方向に速さ $\hbar k/m$ で移動する．もう一つは $B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ からつくられ，強さ $|B|^2$ をもち，同じ速さであるが逆の向きに移動する．さらに，これら二つの項がけっして干渉しないように，漸近区域のなかで十分遠方に位置し，一つがそこにやってくるよりずっと以前に，もう一つがそこを出ていってしまうようにすることはつねに可能である．しかし，この波動関数によって一個の粒子のふるまいの経過を表わす束をつくる代りに，この波そのものは非常に多数の粒子の統計的な集団を表わし，考えている漸近区域内では，x の増す向きに速さ $\hbar k/m$ で移動する密度 $|A|^2$ の束（たば）と，同じ速さで逆の向きに移動する密度 $|B|^2$ の束（たば）から構成されていると考えることもまた十分に可能である(*) ——そしてこれこそまさにわれわれが述べたい解釈であった．与えられた一点を通る粒子の（x の増す向きを正にとった）全流束は，正の向きに移動する粒子の流束 $(\hbar k/m)|A|^2$ と負の向きに移動する粒子の流束 $(\hbar k/m)|B|^2$ との差である．それは一つの定数を除いてロンスキアン $W(\psi,\psi^*)$ に等しい：

$$\frac{\hbar k}{m}[|A|^2-|B|^2] = \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{\hbar k}{m}W(\psi,\psi^*).$$

それゆえ区間 $(-\infty,+\infty)$ の両端でロンスキアン $W(\psi,\psi^*)$ が等しいということは，単

---

(5) 二つの関数のロンスキアンが双1次で反対称であるという性質を利用し，また

$$W(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}) = W(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}) = 0 \quad と \quad W(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx}) = 2\mathrm{i}k$$

に注意すると，この計算はとりわけやさしく行なわれる．

(*) ［訳注］ この場合，その束のなかの粒子の密度は十分小さくて，粒子と粒子のあいだの相互作用が無視でき，各粒子は独立でなければならない．

位時間に考えている力の作用範囲に侵入する粒子の個数がそこから出てゆく粒子の個数に等しいことを意味する.

この解釈によれば,(37) も (38) もそれぞれうまく

(入射流束)−(反射流束) = (透過流束)

と書き表わされる.

同じ解釈にしたがって,**透過率**Tはつぎのように定義される.

$$T \equiv \frac{\text{透過流束}}{\text{入射流束}}.$$

特に

$$T_u = \frac{k_+}{k_-}|S_u|^2, \qquad T_v = \frac{k_-}{k_+}|S_v|^2$$

となる.(39) の両辺の絶対値を等しいと書くと,等式

$$T_u = T_v \tag{41}$$

が得られる.与えられたエネルギーに対して,波動の透過率は進行の向きによらない.これは透過率の相反性であり,その特殊な例については,すでに72頁と80頁に示したものである.一つのポテンシャル壁は,どの向きに越えるのも同じ程度にむずかしい,と言ってよい.

等式 (40) の両辺の絶対値をとり,保存関係 (37),(38) と結びつけると,もう一度相反関係 (41) が得られる.

(39) と (40) から,われわれはまた反射波と透過波の(複素)振幅の偏角のあいだにあるつぎの関係を得る(*).

$$\text{偏角}\ (S_u) = \text{偏角}\ (S_v), \qquad \text{偏角}\left(\frac{R_u}{S_u}\right) = \pi - \text{偏角}\left(\frac{R_v}{S_v}\right).$$

この関係がいくらかの興味をひくのは,位相が波束の伝播におけるある《遅れ》に結びつけられることによる.われわれは第1章(§3と9)において,$\hbar\partial(\text{位相})/\partial E$ という量,すなわち反射波または透過波の位相(=複素振幅の偏角)の,エネルギーに関する変化率に$\hbar$を掛けたものは時間の次元をもち,波が反射または透過する際に起こる《遅れ》と解釈されることを,何度か繰り返して見てきた.この解釈は一般の場合に拡張される.

§12. 束縛状態の節の個数

今度はとびとびのスペクトルの固有関数(それが存在するとして)について考える.この場合,縮退はない.したがってこれらの関数は,位相の定数を除いて必ず実数である.

(*) [訳注] ここでも phase を一応“偏角”と訳しておいた.

83頁の記号をここでも使う．y_1 と y_2 は実数で $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ と仮定し，y_1 の隣りあう二つの零点を積分区間の端にとって関係式 (27) を適用する．そうすると

$$y_2 y_1' \Big|_a^b = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_a^b y_1 y_2 \, \mathrm{d}x.$$

区間 (a, b) で y_1 は定符号を保つ．たとえば $y_1 > 0$ と仮定する．このとき $y_1'(a) > 0$, $y_1'(b) < 0$. したがって y_2 は確かに区間 (a, b) 内で符号を変える．なぜなら，そうでなければ，この等式の右辺は y_2 と同符号，左辺は反対の符号になるからである．それゆえ y_2 は確かにこの区間 (a, b) の内部に少なくとも一つの零点をもつ．y_1 の二つの節のあいだには，つねに y_2 の節が少なくとも一つある．

y_1 と y_2 はこのとびとびのスペクトルの固有関数であるとする．これらは二つとも区間 $(-\infty, +\infty)$ の両端で（《指数関数的に》）0になる．y_1 の n_1 個の節は，この区間を (n_1+1) 個の部分区間に分ける．これらの一つ一つにいま証明した性質を適用すると，関数 y_2 は少なくとも (n_1+1) 個の節をもつ．したがって固有値が大きくなるほど，固有関数は多くの節をもつ．

固有関数の構成に関する88頁の議論を繰り返し，エネルギー ε を大きくするにつれて関数 $\hat{y}_-$ と $\hat{y}_+$ の節の個数が増加するのを順にたどれば，上のことをもっと精確にしてつぎのように述べることができる（問題4と5）．

エネルギー $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n, \cdots$ の増す順に固有状態を並べると，固有関数も同じように節の個数の多くなる順に並べられ，n 番目の固有関数は $(n-1)$ 個の節をもち，これらの節のあいだには，それ以後の固有関数がいずれも少なくとも一つの節をもつ．

§13. 直 交 関 係

(27) の積分の両端 a と b をそれぞれ $-\infty$ と $+\infty$ に近づけると，ロンスキアン定理（系I）からいま一つのきわめて重要な結果が得られる．

とびとびのスペクトルの異なる二つの固有値に属する二つの固有関数を y_1 と y_2 とする．これらはどちらも二つの無限遠で0になり，そのロンスキアンも同様である．また $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \neq 0$ であるから

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y_1 y_2 \, \mathrm{d}x = 0. \tag{42}$$

二つの（実）関数の積 $y_1 y_2$ の全空間における積分が0であるとき，この二つの関数は直交するという．もっと一般に，二つの複素関数 y_1, y_2 は

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y_1^* y_2 \, \mathrm{d}x = 0$$

のとき直交するという．したがってとびとびのスペクトルの固有関数は直交する．

明らかにこの結果は，二つの固有関数の一方だけがとびとびのスペクトルに属するときにも成り立つ．

二つの固有関数が連続スペクトルに属するときは，等式 (27) の極限への移行はずっと微妙である．ロンスキアン $W(y_1, y_2)$ は積分区間の少なくとも一端で限りなく振動するから，積分 $\int y_1 y_2 \mathrm{d}x$ も同じ性質をもつ．それにもかかわらず，積分のなかの固有関数の少なくとも一つ，たとえば y_2 を，ε_2 のまわりのエネルギーの小範囲 $\delta\varepsilon$ の固有関数からつくられる波束で置き換えると，$\delta\varepsilon \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$ という極限において，直交関係を確かめることができる．事実，y_2 がエネルギー ε の関数である (6) ことをはっきり示すために，これを $y(x;\varepsilon)$ という形に書く．そして波束

$$Y_2(x;\delta\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{\delta\varepsilon}} \int_{\varepsilon_2}^{\varepsilon_2+\delta\varepsilon} y(x;\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \tag{43}$$

をつくる．ロンスキアン $W(y_1, y_2)$ は関数 y_2 について線形であるから，(27) の両辺を積分して

$$W(Y_2, y_1)\Big|_a^b = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\int_a^b y_1 Y_2 \,\mathrm{d}x = \int_a^b y_1 \left[\frac{1}{\sqrt{\delta\varepsilon}} \int_{\varepsilon_2}^{\varepsilon_2+\delta\varepsilon} (\varepsilon - \varepsilon_2)\, y(x;\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon\right] \mathrm{d}x$$

を得る(*)．この取り扱いの利点は，漸近区域で y_2 が振動的な挙動を示すのに，Y_2 は ($1/x$ のように) 0に近づくということからくる．a と b をそれぞれ $-\infty$ と $+\infty$ に近づけると，左辺は0に近づき，右辺の二つの積分は収束して和が0になる．$\delta\varepsilon \ll |\varepsilon_2 - \varepsilon_1$ となる極限において，二番目の積分は無視される．それゆえわれわれは

$$\lim_{\delta\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} y_1(x)\, Y_2(x;\delta\varepsilon)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{42'}$$

と書くことができる．(43) によって定義された波束 $Y_2(x;\delta\varepsilon)$ を，関数 $y_2(x)$ の《固有微分》と呼び，このなかの $\delta\varepsilon$ はきわめて小さい量であり，場合によっては計算の終りで0に近づけるものである．

結論として，異なる固有値に属する二つの固有関数は直交する．ただし，二つの固有関数が連続スペクトルに属するときは，直交関係のなかで少なくとも一つの固有関数をその固有微分に置き換えなければならない (式 (42')) と規約する．

われわれはこの固有微分という概念について，かなり形式的に話を進めてきた．実際問

(6) 実際は，ε を与えるだけでは解 $y(x;\varepsilon)$ を定めるのに十分でない．固有値に縮退がないかあるかによって，解はさらに一つあるいは二つの任意定数に関係する．この任意性を除くために，積分区間の一端，$-\infty$ または $+\infty$ における $y(x;\varepsilon)$ の漸近式に適当な条件をつける．

(*) [訳注] 数学的に言うと，これだけではやや不十分なように思われる．

題でこれを使うことはけっしてない．あとでわかるように，われわれには手際のよい数学的手段が与えられており，それによると固有微分の概念に訴えることなく，直交性に対してそのきわめて一般的な性格を保存することができる．

§14. 偶奇性についての注意

偶奇性の概念にもどろう．はじめてこれが現われたときには，無限に深い井戸に関連していたが，この性質はまったく一般的なものである．

ポテンシャル $U(x)$ が偶のとき，すなわち

$$U(x)=U(-x)$$

のときには，x を $-x$ に変えてもシュレーディンガーのハミルトニアンは変わらない．それは原点のまわりの反転に関して不変である．したがって，$\phi(x)$ が固有値Eの固有関数であるとき，すなわち

$$H\phi(x)=E\phi(x)$$

のとき，x を $-x$ に変えてもこの方程式は成り立つから，

$$H\phi(-x)=E\phi(-x).$$

$\phi(x)$，$\phi(-x)$ と同様に，偶関数 $\phi(x)+\phi(-x)$ も奇関数 $\phi(x)-\phi(-x)$ も同じ固有値Eの固有関数である．確かに，あとの二つの関数のうち少なくとも一つは恒等的に0ではない．そこで二つの場合が起こりうる．

1)　固有値Eが縮退していないとき．

上の四つの関数は，一つが他の何倍かになる．$\phi(x)+\phi(-x)$ と $\phi(x)-\phi(-x)$ のうちの一つは恒等的に0ではなく（他の一つは必ず恒等的に0），$\phi(x)$ はその何倍かになる．言いかえると，スペクトルが縮退していない部分の固有関数は，はっきり決まった偶奇性をもつ．あるところでは偶関数，他のところでは奇関数である．一方，偶関数は必ず偶数個の節をもち，奇関数は奇数個の節をもつ．それゆえ，固有エネルギーの増す順に固有関数を並べると，交互に偶関数と奇関数が現われ，基底状態の固有関数はつねに偶である．§5の結果はこの予想とよく一致する．

2)　固有値Eが縮退しているとき．

この場合はϕとφを線形独立な二つの固有関数とすると，すべての固有関数は $\lambda\phi+\mu\varphi$ という形に書き表わされる．これら二つの関数の少なくとも一つ，たとえばϕがはっきり決まった偶奇性をもたないと仮定する．この条件の下で，$\phi_{+}=\phi(x)+\phi(-x)$ と $\phi_{-}=\phi(x)-\phi(-x)$ はどちらも，恒等的に0ではない．これら二つの関数は相反する偶奇性をもつから，必ず線形独立であり，また前に述べたように，同じ固有値 E の固有関数であ

る．それゆえ ψ, φ したがって $\lambda\psi+\mu\varphi$ は，これら二つの関数の線形結合の形で表わされる．その結果，縮退した固有値の固有関数はいつでも，偶奇性のはっきり決まった二つの関数の線形結合の形に書き表わされる．

さらに，連続スペクトルの固有値がすべて二重に縮退しており，そのおのおのに（原点で0の導関数をもつ）一つの偶関数と，（原点で0になる）一つの奇関数が対応することも，簡単な考察により納得される．

問題になっている系のハミルトニアンがある変換に関して不変であるということは，量子力学においてしばしば起こる．この不変性の結果として，シュレーディンガー方程式の固有解に，ある特有の対称性が生じる．偶奇性はこのような事情のきわめて簡単な一例を与える．

演 習 と 問 題

1. §6で定義した井戸型ポテンシャルの問題において，解 χ を表わす式 (22) に現われる定数 P, Q, R, S を，井戸のパラメータの関数として計算せよ．また，透過率を与える式 (23) と保存関係 (24) を確かめよ．$KL \gg \pi$ と $\zeta < \eta \ll 1$ を仮定し，透過波の《透過時間》と反射波の《反射時間》を定めよ．共鳴を明らかにし，透過波の運動を対応する古典粒子の運動と比較せよ．

2. §7で定義したポテンシャル障壁の透過率を計算せよ．透過波の《透過時間》を計算し，この波の運動と古典粒子の運動とを比較せよ．

3. $x<0$ に対しては無限大の障壁をもち，x が正の範囲では

$$\begin{cases} V(x) = V_{\mathrm{I}} & (0<x<a) \\ V(x) = V_{\mathrm{II}} & (a<x<b) \\ V(x) = 0 & (x>b) \end{cases}$$

の形をもつ階段型ポテンシャルのなかの粒子の運動を調べる．$V_{\mathrm{I}} < 0 < V_{\mathrm{II}}$ と仮定する．$x=0$ で反射する波束の運動と，対応する古典粒子の運動とを比較せよ．特に入射エネルギー E が V_{II} より小さいときの《反射の遅れ》を調べよ．

共鳴を明らかにして，この共鳴の幅と反射の遅れとのあいだの関係を，$E \ll V_{\mathrm{II}}$ で $(b-a)\sqrt{2mV_{\mathrm{II}}} \gg \hbar$ の極限において調べよ．

4. 任意のポテンシャル内での1次元の運動を考えると，1粒子のエネルギー・スペクトルは，場合によりとびとびの部分をもつ．エネルギーの増す順にとびとびのスペクトルの固有状態を並べると，固有関数もまた節の個数が増す順に並べられ，n 番目の固有関数は $(n-1)$ 個の節をもち，それらの節のあいだには，それ以後の固有関数がいずれも少なくとも一つの節をもつ．このことを示せ．

5. 1次元の運動をしている粒子が領域 $(0, \infty)$ で受けているポテンシャル $V(x)$ が，$(x \to \infty$ で) 漸近的に0に近づき，$x=0$ では無限に反発的な障壁で区切られている．束

縛状態の個数は，限りなく0に近い負のエネルギーに対応するシュレーディンガー方程式の，原点で0になる解の節の個数に等しい．このことを示せ．

第4章　波動－粒子二重性の統計的解釈と不確定性関係

§1. 序　　説

微視的現象に関する実験的事実と，古典理論による予想とのあいだにある不一致の深い原因を除こうとすると，きわめて広い範囲に適用される二つの結論に到達する．

第一はわれわれが作用の原子化と呼んだもので，これは微視的物理学における不連続性の出現を説明する．すなわち，物理系の作用の変化，物理系のあいだの作用の交換がとびとびで分割されない量子によってしか行なわれないという事実である．われわれはこの新しい概念について第1章で詳細に論じ，古典理論の枠のなかでこれらの現象を記述することが，作用量子$\hbar$を無限小として扱うことができる極限の場合でない限り，どういうように不可能であるかを見てきた．

第二の結論は**波動－粒子二重性**，すなわち微視的な対象が場合により二つの両立しない姿，つまり波動という姿と粒子という姿のどちらか一方を借りて現われるというきわめて一般的な性質である．さらに，この二重性という性質は，波動と粒子の一般的な対応関係(第2章(5))に$\hbar$が現われることからわかるように，作用の原子化ときわめて密接に結びついている．われわれは，この二重性というきわめて一般的な性質がどうしてかなりあとまで認識されなかったか，またこの事実の認識が自然の系に関する量子論の建設にどれほど決定的な役割を演じたかを見てきた．

回折実験の経過の組織的な検討(第1章§5と6，第2章§7と8)の結果，この二重性の解釈のうち，想像しうる限り最も簡明なものは，一つの微視的対象の波動という姿と粒子という姿のあいだには統計的関係が存在し，空間のある領域における波動の強さは，そこに粒子を見いだす確率を与えるという解釈であることがわかった．この統計的解釈をわれわれはこの章で詳しく説明し，またこの解釈の内的な整合性と実験的事実との無矛盾性を吟味する．

第I節では，物質系の波動力学における波動関数の統計的解釈を展開する．この節の議論と結果に導かれて，われわれは第II節において波動－粒子二重性の統計的解釈からきわめて一般的な結果である，ハイゼンベルクの不確定性関係を引き出す．第III節でわれわれが示すのは，測定装置自身もまた同じ関係にしたがう量子的対象であり，したがって，測定装置の介入により測定される系の変化に生じる乱れは，けっして任意に小さくできるも

のでもなく，完全に制御できるものでもないという事実を考慮に入れれば，この不確定性関係は，それがどれほどショッキングに見えようとも，実験によって破ることはどうしてもできない，ということである．

もっと正確に言うと，微視的なスケールで対象を測定手段から切り離すことは，完全に厳密な意味では不可能である．さて，普通の言葉で測定の操作を述べるときには，測定の対象と，この測定を行なうために役立ちうるすべてのものとのあいだに，はっきりした分離を暗黙のうちに仮定している．そこで測定装置の介入は制御できない乱れとして現われ，それが有限で0でないという性格は作用の原子化に直接由来する．この制御できない乱れの存在により，主体と客体とのあいだにあるこの必要な区別に対して事実上一つの制約が置かれ，現象の記述に関する古典的な概念の訂正が生じる．この問題が本章第IV節の主題である．

I．波動力学における波動関数の統計的解釈

§2. 一つの粒子の位置と運動量の測定結果に関する確率

まずはじめにただ一つの粒子から成る量子系の場合を取り扱う．その波動関数を $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ で表わそう．これはシュレーディンガー方程式にしたがい，初期時刻 t_0 における値 $\Psi(\boldsymbol{r}, t_0)$ が知られれば，すべての時刻において完全に決められる．差し当たっては，与えられたある時刻 t における状態を考えることにし，この時刻における粒子の波動関数を単に $\Psi(\boldsymbol{r})$ で表わす．

古典粒子の力学的状態は各瞬間においてその位置 $\boldsymbol{r}(x, y, z)$ と運動量 $\boldsymbol{p}(p_x, p_y, p_z)$ を正確に与えることによって定められる．これに反して，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ はある空間的なひろがりをもつから，量子的粒子に正確な位置を与えることは不可能であり，ただ，位置の測定が行なわれるときに空間のある範囲に位置する粒子を見いだす確率を定めることができるだけである．体積要素 $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r})$ のなかに粒子を見いだす確率を $P(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ で表わそう．有限な空間領域 V のなかにそれを見いだす確率 $P(V)$ は，《存在の確率密度》$P(\boldsymbol{r})$ をこの領域のなかで積分することによって得られる：$P(V)=\int_V P(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$. 同様に，一つの量子的粒子に正確な運動量を与えることは一般にはできない．伴う波動が平面波 $e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}$ ならば，ド・ブロイの対応法則にしたがって，この波動はちょうど運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ の粒子を表わすが，一般に波動 Ψ は，いろいろな波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ をもつ平面波の重ね合わせである．われわれはただ，運動量の測定が行なわれるときに運動量空間のある範囲内に運動量を見いだす確率を定めることができるだけである．領域 $(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p})$ 内にこの粒子の運動量を見いだす確率を $\Pi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p}$ で表わそう．これから運動量空間の有限な領域 D 内に運

動量を見いだす確率 $\Pi(D)$ は，積分 $\Pi(D)=\int_D \Pi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p}$ によって得られる．確率密度 $P(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{p})$ は必ず正の量であり，当然の条件

$$\int P(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=1, \qquad \int \Pi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p}=1 \tag{1}$$

を満たす．ここで左辺の積分の範囲はそれぞれ配置空間の全体および運動量空間の全体である．

分布 $P(\boldsymbol{r}), \Pi(\boldsymbol{p})$ は，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ が知られれば完全に決定される．$P(\boldsymbol{r})$ は関係式

$$P(\boldsymbol{r})=\Psi^*(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r})=|\Psi(\boldsymbol{r})|^2 \tag{2}$$

によって定義される．この定義は，一点における波動の強さが増すにつれてその点における粒子の存在確率が大きくなるという着想にうまく適合する．条件（1）は波動関数に規格化条件

$$N\equiv\int|\Psi(\boldsymbol{r})|^2\mathrm{d}\boldsymbol{r}=1 \tag{3}$$

を課する．これは，関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ が二乗積分可能であり，そのノルムが時間の経過によって変わらないことを前提にしている．統計的解釈の無矛盾性に関するこの第2の条件が実際に満たされることは，§3で示される．

$\Pi(\boldsymbol{p})$ を定めるために，われわれは波動 Ψ に伴う粒子の運動量の測定を考える．これは複合光波のスペクトル分析の問題と類似の問題である．回折装置の助けを借りて運動量の測定を行なえば，この類似は特に明瞭になるけれども，ここでは用いられる測定装置の性質そのものに関係なく論じる．われわれは波動関数のフーリエ変換 $\Phi(\boldsymbol{p})$ を導入するが，これはつぎのようにして定義される(1)：

$$\Phi(\boldsymbol{p})=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int\Psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{4}$$

$$\Psi(\boldsymbol{r})=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int\Phi(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}. \tag{5}$$

（5）により，$\Psi(\boldsymbol{r})$ ははっきり決まった運動量 $\boldsymbol{p}$ に対する要素波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}$ の線形結合とみなされ，各要素波には係数 $(2\pi\hbar)^{-3/2}\Phi(\boldsymbol{p})$ が割り当てられていると考えられる．もしもこの結合がただ一つの項 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}$ だけしか含まないならば，測定の結果は確かに $\boldsymbol{p}_0$ となるであろう．もし $\Phi(\boldsymbol{p})$ が，第2章で学んだ波束の場合のように，$\boldsymbol{p}_0$ を含む小さな領

(1) 等式（4）と（5）の右辺の積分が収束しないときには，関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ が二乗積分可能であることに注意し，付録A（§16）の定理Iで指定したように積分を修正しなければならない．今後の諸結果はこれによって影響されない．これからあと，厳密性に関するこれらの問題点は，つねに言外に含まれているとする．

域のなかだけで目立った値をとるならば，実験は求める値がほとんど確実に p_0 の近傍にある値であることを示す．もっと一般に，体積要素 $(p, p+dp)$ のなかに運動量の値を見いだす確率 $\Pi(p)dp$ は，$|\Phi(p)|$ が大きくなるほど大きくなる．こうしてわれわれは

$$\Pi(p) = \Phi^*(p)\Phi(p) = |\Phi(p)|^2 \qquad (6)$$

と置くことになる．内積は，フーリエ変換によって保存される（付録A，§16の定理IV）から

$$\int |\Phi(p)|^2 dp = \int |\Psi(r)|^2 dr$$

となり，$\Psi(r)$ が1に規格化されていれば，規格化条件（1）は自動的に満たされる．

フーリエ変換は二乗積分可能な関数 $\Psi(r)$ と $\Phi(p)$ とのあいだに一対一の対応を定める．それゆえ，関数 $\Phi(p)$ を与えることによって，$\Psi(r)$ を与えるのと同様に，粒子の力学的状態が定められる．そこで $\Phi(p)$ を運動量空間における波動関数と名づけるが，定義（2）と（6）において関数 Ψ と Φ がまったく対称的な役割を演じているから，この用語はいっそう適切である．また，関数 Ψ と Φ は同じ力学的状態の同値な表現であると言われる．

ここで定義した量 $P(r)$ と $\Pi(p)$ の物理的意味をよく理解しておかなければならない．この波動に伴う粒子は，一般に正確な位置も正確な運動量ももたない．これらの力学変数の一方または他方の測定を，Ψ によって表わされる単独な系に対して行なうときは，結果について何も予想することはできない．ここで考えている予想は，互いに独立で一つ一つは同じ波動関数 Ψ によって表わされるようなきわめて多い個数 $\mathcal{N}$ の同値な系に適用される．その各系について位置の測定を行なうとき，この統計的集団のメンバーの数 $\mathcal{N}$ が無限大に近づく極限において，$P(r)$ は $\mathcal{N}$ 個の測定結果の分布を与える．測定するものが運動量ならば，同様にして $\Pi(p)$ が運動量の測定結果の分布を与える．

波動関数から $P(r)$ と $\Pi(p)$ を定義する際，基礎にしているのは，定義のもっともらしさと，そのなかにある論理性についての考慮である．この種の議論に基づき採用しうるものとしては，（2）と（6）が唯一のものであるということは自明でない．実際に，この $P(r)$ と $\Pi(p)$ は原理的には実験結果と直接比較できる量である．定義（2）と（6）はこの比較が成功するとき最終的に正当化される．

§3. 時間の経過におけるノルムの保存

前項に述べた確率の定義が首尾一貫するためには，波動関数のノルムNが時間に対して定数でなければならない．ところで，関数 Ψ と Ψ^* はそれぞれシュレーディンガー方程

式（第2章（33））とその複素共役方程式を満たす．すなわち

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi, \qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* = -(H\Psi)^*.$$

したがって

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \Psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right)+\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right)\Psi = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\Psi^*(H\Psi)-(H\Psi)^*\Psi]. \tag{7}$$

等式（7）の両辺を配置空間で積分すると

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int[\Psi^*(H\Psi)-(H\Psi)^*\Psi]\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

となる．ノルムが時間に対して定数となるためには，

$$\int\Psi^*(H\Psi)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int(H\Psi)^*\Psi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{8}$$

となることが必要十分である．粒子の力学的状態がどうであっても，したがって配置空間で二乗積分可能なすべての関数 Ψ に対して，この性質が満たされなければならない．

演算子の言葉によると，Hのような演算子は，これが定義された関数空間に属する任意の関数Ψに対して性質（8）を満たすとき，エルミートであると言われる．エルミート演算子のおもな性質は第5章で学ぶ．

シュレーディンガーのハミルトニアンが実際にこのエルミート性をもっていることを確かめよう．われわれは，スカラー・ポテンシャル内の1粒子の場合に限って調べる（電磁場内の荷電粒子の場合は問題1で取り扱う）．このとき

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r}).$$

$V(\boldsymbol{r})$ は実の量であるから，等式（8）はこの場合

$$\int[\Psi^*(\Delta\Psi)-(\Delta\Psi)^*\Psi]\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = 0$$

と書かれる．左辺の積分範囲が曲面Sによって限られたある領域であるときは，グリーンの定理を適用して，この積分は面積分

$$\int_S\left(\Psi^*\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}n}-\frac{\mathrm{d}\Psi^*}{\mathrm{d}n}\Psi\right)\mathrm{d}S$$

に等しくなる．ここで $\mathrm{d}/\mathrm{d}n$ は外向き法線方向の導関数である．積分範囲を全空間に近づけることにより，左辺の積分がもう一度得られる．この極限において，曲面Sのすべての部分は限りなく遠ざかる．ところで，波動Ψは物理系の力学的状態を表わすから，必ず二

乗積分可能である．したがって面積分は0に近づく(*).　　　(証明終)

それゆえ，規格化条件（3）は初めの時刻において満たされていさえすれば，それ以後の各瞬間においてつねに満たされる．シュレーディンガー方程式は同次であるから，その解は一つの定数を除いて定められる．初期時刻における規格化条件はこの定数の絶対値を決定する．その位相はなお任意である．

§4. 流れの概念

流れという概念を導入すると，ノルム保存の性質はきわめて簡単に解釈される．等式（7）の右辺はいつでもあるベクトル，確率の流れの密度ベクトルあるいは流れベクトルの発散という形にすることができる．ここではスカラー・ポテンシャル内の1粒子の場合に限定しよう（問題1を参照）．点 $\boldsymbol{r}$，時刻 t における流れ $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)$ を

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \frac{\hbar}{\mathrm{i}m} \nabla \Psi\right] \tag{9}$$

によって定義する．容易に

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{J} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\Psi^*(H\Psi) - (H\Psi)^*\Psi\right] \tag{10}$$

であることが確かめられる．これによって等式（7）は

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \mathrm{div}\,\boldsymbol{J} = 0 \tag{11}$$

という形に書かれる．

関係式（11）は流体力学でなじみ深い．これはわきだしも吸込みもない媒質のなかで密度 P，流れ $\boldsymbol{J}$ をもつ流体の保存法則である．そこで，量子的粒子の運動を古典流体の運動と同じように扱うことが考えられる(2)．与えられた空間領域 $\mathcal{V}$ に含まれる流体の質量はこの領域における密度 P の積分である．等式（11）から，$\mathcal{V}$ に含まれる流体の質量の時間に対する変化率は

$$-\int_{\mathcal{V}} \mathrm{div}\,\boldsymbol{J}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\int_S \boldsymbol{J}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S},$$

すなわちこの領域を限る曲面 S を通過する流れベクトルの流束に等しいというよく知ら

(*)［訳注］厳密に言えば，$\partial\Psi/\partial n$ の二乗積分可能性をも前提とする必要があるが，Ψ は十分《すなお》で無限遠では $\partial\Psi/\partial n$ も Ψ と同じ程度にすみやかに0となると仮定しておく．

(2) もちろん，この確率の流れと古典流体との類似をあまり遠くまで推し進めてはならない．この類似に基づいて得られるイメージは，いずれも性質（11）以上のものを含まない（第4章を参照）．

れた結果が出てくる．$\mathcal{V}$ が全空間を占める極限において，Sを横切る流束が0に近づくならば，全質量は一定に保たれる（ノルムの保存）．

$\boldsymbol{J}$の定義はある任意性をもつのが欠点である．発散0のベクトルをベクトル$\boldsymbol{J}$につけ加えても性質（11）は保たれる．それにもかかわらず，定義（9）は簡単であるという長所をもつ．その上，これは流れの古典的定義との対応によって導かれる．実際，対応原理によって，演算子 $(\hbar/\mathrm{i}m)\nabla$ は量 $\boldsymbol{p}/m$，すなわち粒子の速度を表わす．量 $\boldsymbol{J}$ は速度と密度の積，すなわち流れに対応する．特に Ψ が平面波 $A\exp[(\mathrm{i}/\hbar)(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)]$ のときは，$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=|A|^2(\boldsymbol{p}/m)$ は実際に（確率の）密度と速度との積に等しい．

性質（11）はノルム保存の性質よりはるかに一般的である．関数Ψがシュレーディンガー方程式の定常解ならば，

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$$

で，ノルム保存の性質は自明あるいは無意味である．束縛状態ではこれは自明であるが，非束縛状態では，関数ϕは二乗積分可能でないからこれは無意味である．ところがいずれの場合でも等式（11）はやはり成り立ち，密度 $|\phi|^2$ は時刻に無関係であるから，これは

$$\operatorname{div}\boldsymbol{J}=0 \tag{12}$$

と書かれる．固有関数ϕのこの性質は，ハミルトニアンに現われるポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の形によらないから，知っておく価値がある[3]．

§5. $\boldsymbol{r}$ あるいは $\boldsymbol{p}$ の関数の平均値

確率密度 P と Π に対して採用された定義が矛盾を含まないことを確かめたので，これを使って $\boldsymbol{r}$ または $\boldsymbol{p}$ の関数の平均値を計算することができる．

与えられた時刻における位置の測定結果の分布 $P(\boldsymbol{r})$ を知れば，粒子の座標の任意の関数 $F(\boldsymbol{r})\equiv F(x,y,z)$ がこの時刻にとる平均値を定義することができる．この平均値に与える物理的意味は，$P(\boldsymbol{r})$ を定義したときに詳しく述べたのと同じである．これは，同じ波動関数 Ψ で表わされ，互いに独立な非常に多い個数 $\mathcal{N}$ の同等な系について，$F(\boldsymbol{r})$を測定した結果の平均値である．

この量を記号 $\langle F(\boldsymbol{r})\rangle$ で表わす．明らかに

$$\langle F(\boldsymbol{r})\rangle=\int P(\boldsymbol{r})\,F(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

同様に，運動量の関数 $G(\boldsymbol{p})\equiv G(p_x,p_y,p_z)$ の平均値として

---

(3)　1次元の問題でロンスキアン $W(y^*,y)$ の保存の性質が果たした役割（第3章§11を参照）を，3次元の問題でこの性質が果たす．

$$\langle G(\boldsymbol{p})\rangle = \int \Pi(\boldsymbol{p})\, G(\boldsymbol{p})\, \mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

を得る．§2で採用した確率密度の定義を使うと，（積分が収束することを条件として）式

$$\langle F(\boldsymbol{r})\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r})\, F(\boldsymbol{r})\, \Psi(\boldsymbol{r})\, \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{13}$$

$$\langle G(\boldsymbol{p})\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p})\, G(\boldsymbol{p})\, \Phi(\boldsymbol{p})\, \mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{14}$$

を得る．たとえば粒子の座標 x の平均値は

$$\langle x\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r})\, x\, \Psi(\boldsymbol{r})\, \mathrm{d}\boldsymbol{r}, \tag{15}$$

運動量の成分 p_x の平均値は

$$\langle p_x\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p})\, p_x\, \Phi(\boldsymbol{p})\, \mathrm{d}\boldsymbol{p}. \tag{16}$$

付録Aに述べるフーリエ変換の性質を利用して，（16）のもう一つの形を与えよう．関数 $p_x\Phi(\boldsymbol{p})$ が二乗積分可能ならば——これらはいつも成り立っていると仮定して——そのフーリエ変換は $(\hbar/\mathrm{i})(\partial/\partial x)\Psi(\boldsymbol{r})$ である（付録Aの定理III）．関数 Φ と $p_x\Phi$ に内積保存の性質（付録Aの定理IV）を適用すれば，

$$\langle p_x\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r}) \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(\boldsymbol{r})\, \mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{17}$$

（16）と（17）の右辺のあいだにある形式的類似に注意しよう．前者から後者へ移るには，$\boldsymbol{p}$ についての積分を $\boldsymbol{r}$ についての積分に，$\Phi(\boldsymbol{p})$ をそのフーリエ変換に，$\Phi^*(\boldsymbol{p})$ を同じ変換の複素共役な関数に，p_x を $(\hbar/\mathrm{i})(\partial/\partial x)$ に置き換えればよい．$(\partial/\partial x)$ は，x に関する偏微分演算子を表わし，その右にある関数に作用するものと考える．

同様にして，等式（15）から式

$$\langle x\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p}) \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\right) \Phi(\boldsymbol{p})\, \mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{18}$$

に移る．

この結果はもっと複雑な形の関数に拡張される．たとえば，$p_x^2\Phi(\boldsymbol{p})$ が（二乗積分可能として）

$$\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \Psi(\boldsymbol{r}) = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

のフーリエ変換である（付録Aの定理IIIを二度適用する）という事実から，

$$\langle p_x^2\rangle = \int \Phi^*\, p_x^2\, \Phi\, \mathrm{d}\boldsymbol{p} = -\hbar^2\int \Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\, \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{19}$$

が導かれる．もっと一般に，$G(\boldsymbol{p})$ が p_x，p_y，p_z の多項式または絶対収束級数であると

き，

$$\langle G(\boldsymbol{p})\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r})\, G\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\right)\Psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{20}$$

を得る．これを保証するための収束条件を正確に述べることはやさしい．$F(\boldsymbol{r})$ の平均値についても同じ条件の下に，

$$\langle F(\boldsymbol{r})\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p})\, F(\mathrm{i}\hbar\nabla_{\boldsymbol{p}})\,\Phi(\boldsymbol{p})\,\mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{21}$$

が得られる．

この章の目的である一般論を行なうためには十分な結果が得られたから，関数 Ψ の統計的解釈にはこれ以上深入りしない．位置と運動量の測定値の統計とこれから $F(\boldsymbol{r})$ や $G(\boldsymbol{p})$ のような量の平均値に関して出てくる結果の他にも，Ψ を与えることによって任意の測定可能な物理量の測定値の統計を知ることができる．この問題は第5章で取り扱う．ここではその問題の研究に導くような注意をいくつか与えるだけにしておく．

量 $\langle x\rangle$ と $\langle p_x\rangle$ は実数である．これはその定義による．それゆえ (15) と (17) の右辺も同様である．言いかえれば――これがエルミート性の定義そのものであるが ((8) を参照) ――演算子 x と $(\hbar/\mathrm{i})(\partial/\partial x)$ とはエルミートである．同じように，$\boldsymbol{r}$ の他の二つの成分，$-\mathrm{i}\hbar\nabla$ の他の二つの成分もエルミート演算子であり，したがって関数 F と G が実ならば演算子 $F(\boldsymbol{r})$，$G(-\mathrm{i}\hbar\nabla)$ も同様である．

関数 Ψ で書かれた平均値の表現 (式 (13)，(20)，(15)，(17)) を調べよう．これらはすべて同じ形をしている．平均値を求めようとする量には，ある線形 (エルミート) 演算子 A が対応し，求める値は式

$$\int \Psi^* A \Psi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{22}$$

によって与えられる．ここで演算子は，ふつうの規約にしたがって，その右にある $\boldsymbol{r}$ の関数に作用する．この演算子はきわめて簡単な対応規則によって得られる．位置の座標の関数 $F(\boldsymbol{r})$ が問題ならば，対応する演算子はこの関数自身である．関数 $G(\boldsymbol{p})$ が問題ならば，対応する演算子は，G のなかの $\boldsymbol{p}$ の成分に $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ の成分をそれぞれ代入して得られるものである．われわれはここで運動量 $\boldsymbol{p}$ と演算子 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ の対応規則 (第2章 (17)) にふたたび出会った．これはシュレーディンガー方程式をつくるときに利用したものである．

これらの平均値はいずれも，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ と $\Phi(\boldsymbol{p})$ のどちらを使っても同じように計算される．関数 Φ からつくられた式 (21)，(14)，(18)，(16) は，関数 Ψ からつくられ

た式 (13), (20), (15), (17) とそれぞれ同値である．双方は形の上でも似ている．平均値を求めようとする量には，ある線形（エルミート）演算子B——今度は$\boldsymbol{p}$の関数に作用する演算子——が対応し，求める値は式

$$\int \Phi^* B \Phi \, \mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{23}$$

によって与えられる．演算子Bは，Aを定めたときの規則と同様な対応の規則によって得られる．関数 $G(\boldsymbol{p})$ が問題ならば，演算子は関数自身である．関数 $F(\boldsymbol{r})$ がそれならば，F のなかの $\boldsymbol{r}$ の成分に $\mathrm{i}\hbar\nabla_{\boldsymbol{p}}$($\nabla_{\boldsymbol{p}} \equiv (\partial/\partial p_x, \partial/\partial p_y, \partial/\partial p_z)$) の成分をそれぞれ代入することによって演算子が得られる．

波動関数 Φ と Ψ が同じ力学的状態の同値な表現であるのと同様に，演算子BとAは同じ物理量の同値な表現であって，ここで考えた平均値のように物理的に測定可能な量の計算は，これら二つの表現のどちらを用いても，形式的に同じ方法でなされる．このことは，量子力学が各表現に無関係な一般的方法によって定式化されうることを暗示する．この形式的・一般的記述は第7，8章で与えられる．

§6. 多粒子系への拡張

上に述べた定義と結果は容易に，多くの粒子を含む量子系に拡張される．

まったく一般に，R 次元量子系の波動関数を $\Psi(q_1, \cdots, q_R; t)$ とし，その系の力学変数は，R 個の座標 $q_1, \cdots, q_R$ とそれに共役な R個の一般化運動量 $p_1, \cdots, p_R$ であるとする．われわれはデカルト座標系を仮定し，$\mathrm{d}\tau \equiv \mathrm{d}q_1 \cdots \mathrm{d}q_R$ と $\mathrm{d}\varpi \equiv \mathrm{d}p_1 \cdots \mathrm{d}p_R$ によりそれぞれ q の空間および p の空間内の体積要素を表わす．p の空間の波動関数は

$$\Phi(p_1, \cdots, p_R; t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}R} \int \Psi(q_1, \cdots, q_R; t)\, \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)\sum_i p_i q_i}\, \mathrm{d}\tau$$

である．$|\Psi|^2 \mathrm{d}\tau$ は座標 q を領域 $(\tau, \tau+\mathrm{d}\tau)$ のなかに見いだす確率であり，$|\Phi|^2 \mathrm{d}\varpi$ は運動量 p を領域 $(\varpi, \varpi+\mathrm{d}\varpi)$ のなかに見いだす確率である．これから出発して，前の数パラグラフ (§) の議論をすべて繰り返すことができる．

はっきり説明するために2粒子系を考え，$\boldsymbol{r}_1(x_1, y_1, z_1)$，$\boldsymbol{r}_2(x_2, y_2, z_2)$ によってそれぞれの位置を，$\boldsymbol{p}_1(p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1})$，$\boldsymbol{p}_2(p_{x_2}, p_{y_2}, p_{z_2})$ によってそれぞれの運動量を表わす．$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$ は粒子1を体積要素 $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1+\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1)$ に，粒子2を体積要素 $(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2+\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2)$ に見いだす確率である．$\Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2$ は粒子1の運動量を領域 $(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_1+\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1)$ に，粒子2のそれを領域 $(\boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_2+\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2)$ に見いだす確率である．また，粒子2の位置を指定せずに，粒子1の点 $\boldsymbol{r}_1$ における存在確率密度 $P_1(\boldsymbol{r}_1)$ を導入することができる．この量は粒子2

の位置に構わず粒子1の位置を測定するとき得られる統計分布である．明らかに，

$$P_1(\boldsymbol{r}_1) = \int P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2.$$

同じようにして確率密度 $P_2(\boldsymbol{r}_2)$，$\Pi_1(\boldsymbol{p}_1)$，$\Pi_2(\boldsymbol{p}_2)$ を導入することができる．これらすべての統計分布は本質的に正の量で，規格化条件

$$\iint P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 = 1, \cdots\cdots, \quad \int \Pi_2(\boldsymbol{p}_2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2 = 1$$

を満たす〔記号 $\iint \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$ は全配置空間上の6重積分を表わし，記号 $\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}_2$ は粒子2の運動量空間上の3重積分を表わす，など〕.

与えられた時刻における2粒子系の力学的状態はこの時刻における波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ によって決められる．われわれはフーリエ変換によって運動量空間の波動関数を得る：

$$\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = (2\pi\hbar)^{-3} \iint \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)/\hbar}\, \Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$$
$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = (2\pi\hbar)^{-3} \iint \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)/\hbar}\, \Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2.$$

定義（2）と（6）の一般化は明らかに

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2, \qquad \Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = |\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)|^2 \tag{24}$$

であり，確率の規格化条件は波動関数の規格化条件

$$\iint |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 = \iint |\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)|^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2 = 1$$

を定める．この系のシュレーディンガー方程式に入ってくるハミルトニアンがエルミート演算子ならば，この規格化条件は実際すべての時刻において満たされうる．うまくそうなっていることは容易に確かめられる．それゆえ波動関数 Ψ と Φ は任意定数の位相を除いて決められる．

上の定義から，先に導入した他のいろいろな分布の定義が導き出される．たとえば

$$P_1(\boldsymbol{r}_1) = \int |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2.$$

同様に，位置または運動量の関数 $F(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ と $G(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)$ の平均値の定義もこれから導かれる．たとえば

$$\langle x_1 \rangle = \iint \Psi^* x_1 \Psi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \iint \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial p_{x_1}}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2$$
$$\langle p_{x_2} \rangle = \iint \Phi^* p_{x_2} \Phi\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2 = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \iint \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x_2}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2.$$

§5の終りに述べた注意はすべてそのまま成り立つ．

波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ が

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1)\,\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$$

と因数に分けられるとき（$\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ と $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ は1に規格化されていると仮定して），運動量空間の関数についても，分布 P と Π についても同様になる：

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = P_1(\boldsymbol{r}_1)\,P_2(\boldsymbol{r}_2), \qquad \Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = \Pi_1(\boldsymbol{p}_1)\,\Pi_2(\boldsymbol{p}_2).$$

このことは，これらの量の定義から容易にわかる．言いかえれば，これらの粒子の一つ一つに対して行なわれる測定値の統計のあいだには何の相互関係もない．そのなかの一つ，たとえば粒子1に対して行なわれる測定結果についての統計的予想は，この粒子が波動関数 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ によって表わされる力学的状態にあるときと同じである．実際 Ψ_1 に伴う運動量空間の波動関数を $\Phi_1(\boldsymbol{p}_1)$ で表わすとき，$P_1(\boldsymbol{r}_1) = |\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2$, $\Pi_1(\boldsymbol{p}_1) = |\Phi_1(\boldsymbol{p}_1)|^2$ であることが容易に確かめられる．この粒子に対して行なわれる測定値に関する計算（平均値，ゆらぎなど）に際しては，いつでももう一つの粒子を無条件に無視し，波動関数 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ をもつ1粒子の問題として扱うことができる．

二つの粒子がそれらのあいだで作用しあわないとき，あるいは，何らかの理由により，それらの相互作用が無視できると考えられるとき，この波動関数の因数分解の性質は，時間が経過しても変化しない．事実，この系のハミルトニアンはこの場合二つの項の和

$$H = H_1 + H_2$$

の形に表わされ，その一つ H_1 は変数 $\boldsymbol{r}_1$ の関数に対してだけ作用し，他の一つ H_2 は変数 $\boldsymbol{r}_2$ の関数に対してだけ作用する．初期時刻において，

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 ; t_0) = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t_0)\,\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t_0)$$

と仮定し，$\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)$ と $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t)$ を，シュレーディンガー方程式

$$\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_1\right]\Psi_1 = 0, \qquad \left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_2\right]\Psi_2 = 0$$

の解で，それぞれ初期条件 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t_0)$ と $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t_0)$ をもつものとする．因数分解された波動関数

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 ; t) = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)\,\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t)$$

がこの系のシュレーディンガー方程式を満たすことは，

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi &= \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\Psi_2 + \Psi_1\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right) = (H_1\Psi_1)\,\Psi_2 + \Psi_1(H_2\Psi_2)\\ &= H_1\Psi_1\Psi_2 + H_2\Psi_1\Psi_2 = (H_1+H_2)\,\Psi_1\Psi_2 = H\Psi\end{aligned}$$

によってわかる．

各粒子の運動はまったく独立であるが，これは論理的にも当然であり，どの瞬間におい

ても，各粒子に対して行なわれる測定値の統計のあいだには，何の関係も存在しない．

II．ハイゼンベルクの不確定性関係

§7．一つの量子的粒子の位置－運動量不確定性関係

§2の確率の定義にもどろう．分布 $P(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{p})$ は同じ波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ に基づいて定められるから，互いに独立ではないが，関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ は，先験的には二乗積分可能な任意の関数であってよい．これらのうちの一つは，Ψ を適当に選ぶことによって，どのようにでも定めることができる．たとえば $P(\boldsymbol{r})$ が与えられたときには，$\sqrt{P}$ に等しい絶対値をもつ関数をとりさえすればよい．すなわち $\Psi(\boldsymbol{r})=\sqrt{P(\boldsymbol{r})}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\boldsymbol{r})}$ で，位相 $\alpha(\boldsymbol{r})$ はまったく未定のままである．しかし，分布 $\Pi(\boldsymbol{p})$ を $\alpha(\boldsymbol{r})$ によって定められる汎関数とみなせば，$\alpha(\boldsymbol{r})$ によってかなり大幅に変わりうるとはいえ，$\alpha(\boldsymbol{r})$ を適当に選ぶことによって，あらかじめ与えられた任意の分布 $\Pi(\boldsymbol{p})$ をつくるということは不可能である．分布 $P(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{p})$ とのあいだにいつもある相互関係が存在するという事実は，量子論に固有のものである[4]．これはハイゼンベルクの不確定性関係により，定量的な形で説明される．

初めに1次元における1粒子を考える．その位置を x で，その運動量を p で表わすとしよう．$\psi(x)$ と

$$\varphi(p)=(2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\,\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}px)/\hbar}\,\mathrm{d}x$$

とを，それぞれ x 空間と p 空間において力学的状態を表わす波動関数とする．

ハイゼンベルクの結果は本質的に，波 ψ のひろがりとそのフーリエ変換 φ のひろがりとを同時にいくらでも小さくすることはできないという数学的事実を表わす．波 ψ が x 空間において Δx 程度の領域を占め，波 φ が p 空間において Δp 程度の領域を占めるとき，積 $\Delta x\cdot\Delta p$ はつねに $\hbar$ 程度の量よりも大きい：

$$\Delta x\cdot\Delta p\gtrsim\hbar. \tag{25}$$

---

(4) 量子論を古典統計力学と比較したいと考えるとき，統計的分布 $P(\boldsymbol{r}),\Pi(\boldsymbol{p})$ と対応する古典統計力学の分布 $P_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{r}),\Pi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{p})$ とのあいだにある本質的な相違は事実上ここにある．後者は位相密度 $\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ によって得られる：

$$P_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{r})=\int\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\,\mathrm{d}\boldsymbol{p},\qquad \Pi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{p})=\int\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

$\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ は条件 $\iint\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}=1$ にしたがう正の関数であるが，この条件を除いて任意である．そこで分布 $P_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{r})$ と $\Pi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{p})$ は同時に任意に定められる．実際，これらを導きうるような位相密度として，$\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})=P_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{r})\,\Pi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{p})$ が少なくとも一つ存在するからである．

この結果は，すでに物質波の理論において波束の構成に関連して見いだしたものである．それはまた，もっと間接的な形ではあるが，非束縛状態の重ね合わせによってつくられた波束の変化に関する第3章の議論にも入ってきた．

これが正しいことは，つぎのような半定量的推論によって確かめられる（この議論は，43頁の分析を別の言葉で言い直したものである）．波 $\psi(x)$ はすべて波長 $2\pi/k$ の平面波 e^{ikx} を重ね合わせたものである．パラメータ k が変動する領域の幅を Δk とする．波 $\psi(x)$ がある領域 Δx に制限されるためには，これらいろいろな波の位相の一致がこの領域のなかだけで起こり，空間の他の部分では消しあうように干渉しなければならない．Δx に含まれる波長 $2\pi/k$ の個数は $k\Delta x/2\pi$ である．$\psi(x)$ をつくっているいろいろな平面波が区間 Δx の両端で消しあうように干渉するためには，k がその変域を動くあいだにこの個数が少なくとも一つ変わることが必要である：$\Delta x\cdot\Delta k \gtrsim 2\pi$．ここでは大きさの程度についての議論をしているのであるから，因数 2π にわずらわされることなく，単に

$$\Delta x\cdot\Delta k \gtrsim 1$$

と書く．関係 $p=\hbar k$ によって運動量 p は k に結びついているから，この式よりただちに関係 (25) が導かれる．

ふつう，量 Δx と Δp をそれぞれ位置の不確定さおよび運動量の不確定さと言い，ハイゼンベルクの結果をしばしばつぎのように述べる．

位置の不確定さと運動量の不確定さとの積は $\hbar$ 程度のある量よりつねに大きい．

いくつかの例でこの結果を説明する．

ガウス波束（1に規格化されていない）

$$\psi(x)=\exp\left[\frac{i}{\hbar}p_0x-\frac{(x-x_0)^2}{2\xi^2}\right]$$

は点 x_0 のまわりの幅 ξ の領域を占める．これに対応する運動量空間の波（付録Aの表を参照）

$$\varphi(p)=\frac{\xi}{\sqrt{\hbar}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}x_0(p_0-p)-\frac{1}{2}\frac{\xi^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right]$$

はこの空間のなかで点 p_0 のまわりの幅 $\hbar/\xi$ の領域を占める．ξ を小さくすると，Δx は小さくなるが，それにつれて Δp は大きくなり，それらの積は $\hbar$ 程度に保たれる．

もう一つの例として，《階段型信号》

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ip_0x/\hbar} & (|x|<a \text{ のとき}) \\ 0 & (|x|>a \text{ のとき}) \end{cases}$$

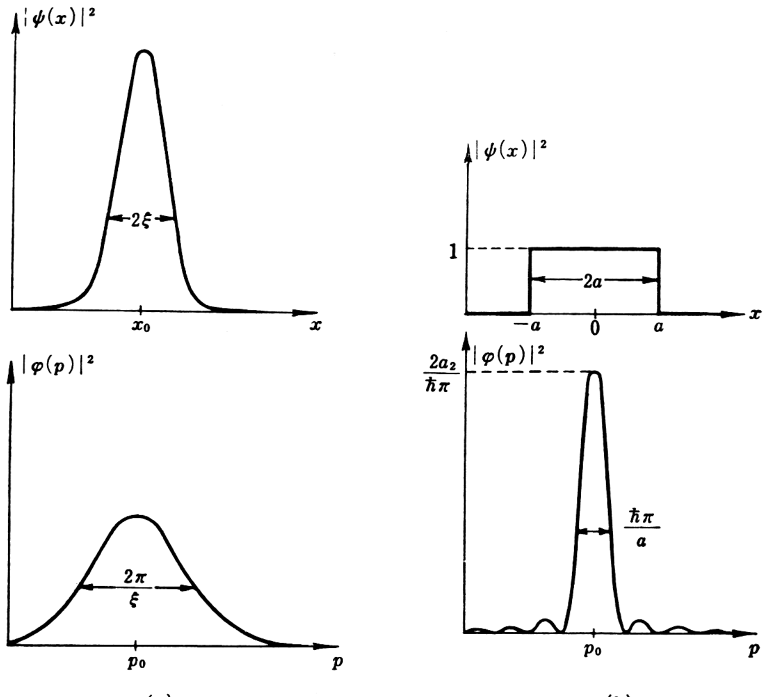
を考えよう．これは点 $x=0$ を囲む幅 $2a$ の領域にひろがっている．この場合は（付録Aを参照）

$$\varphi(p)=\frac{\sqrt{2\hbar/\pi}}{p-p_0}\sin\frac{(p-p_0)a}{\hbar}$$

となる．関数 $|\varphi(p)|^2$ は点 p_0 において際立った最大値を示し，p_0 を両側からはさんで最小値0（$p=p_0+(n\pi\hbar/a)$ のときとられる）が並んでおり，それらのあいだには極大値が入って，その高さは $[1/(p-p_0)]^2$ のように減少する．波 $\varphi(p)$ は主として $|\varphi(p)|^2$ の最大値の両側にある最初の零点のあいだに集中しているということができる．すなわち幅は $\Delta p\simeq 2\pi\hbar/a$ である．$\Delta x\simeq 2a$ が小さくなればなるほど Δp は大きくなり，

$$\Delta x\cdot\Delta p=4\pi\hbar.$$

4・1図はいま調べた二つの波束について，x の関数 $|\psi(x)|^2$ と p の関数 $|\varphi(p)|^2$ の曲線を示す．



4・1図　波束 $\psi(x)$ と $\varphi(p)$ の絶対値の二乗：
（a）ガウス波束の場合；（b）階段形信号の場合．

波 ψ のひろがりについて，そのフーリエ変換のひろがりとくらべながら考えたことは，すべて容易に3次元空間の1粒子の場合に拡張される．位置の三つの座標の不確定さをそれぞれ Δx，Δy，Δz で表わし，運動量に関して対応する量を Δp_x，Δp_y，Δp_z で表わ

す．統計分布 $P(\boldsymbol{r}) = |\Psi(\boldsymbol{r})|^2$ と $\Pi(\boldsymbol{p}) = |\Phi(\boldsymbol{p})|^2$ の相互関係は不確定性関係

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim \hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \gtrsim \hbar \tag{26}$$

によって表わされる．

これまでのところ，不確定性関係は大きさの程度の関係として表わされてきた．いろいろな不確定さを表わす量 Δx, Δp_x などの正確な定義を決めなかった以上，明らかにこれはしかたのないことである．これらの量の適当な定義を採用することにより，われわれは正確な表現に到達するであろう．しかし，正確な表現のもつ価値を過小評価するのではないが，不確定性関係の本質的な興味は，大きさの程度に関する結果のなかにすでに含まれているという事実を十分に強調しておかなければならない．どんな状況の下においても量子的粒子に厳密に正確な位置と厳密に正確な運動量とを同時に与えることはできない．十分に正確な位置と運動量を与えられたものとして，粒子を考えることが許されるのは，作用量子 $\hbar$ が無視できるとみなされる限界の内，言いかえれば古典理論の成り立つ範囲内だけである．

§8. 位置－運動量不確定性関係の正確な表現

書き表わし方を簡潔にするために，1次元における1粒子の場合だけを詳しく取り扱う．われわれは x と p の不確定さに対する正確な定義をつぎのようにとる(5)：Δx と Δp は分布 $|\psi(x)|^2$ と $|\varphi(p)|^2$ の標準偏差とする．§5の記号を使えば(*),

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}, \qquad \Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} \tag{27}$$

となる．量 Δx はこうして位置の測定値と直接に結びつけられ，平均値 $\langle x\rangle$ のまわりの，測定結果の統計的なゆらぎである．同じ注意は運動量の測定に関して Δp にあてはめられる．ごく一般に

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \frac{1}{2}\hbar \tag{28}$$

であることを示そう．

必ず正（または0）になる式

---

(5) これは疑いなく，考えうる限り最も便利な定義である．たいていの場合，このように定義された量 Δx と Δp は，x と p の不確定さというのにふさわしい概念を与える．しかしながら，不確定さに関するこの数学的な定義が，実際に行なわれる大まかな評価とかなり大きく食い違うことも時には起こる．《階段型信号》はこの例外的な型の一例である．(27) で定められる量 Δp は無限大であるのに，この量の大まかな評価は $2\pi\hbar/a$ を与える．

(*) ［訳注］ $\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2-2x\langle x\rangle+\langle x\rangle^2\rangle = \langle x^2\rangle-2\langle x\rangle\langle x\rangle+\langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2$ であるから $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2} = \sqrt{\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle}$ は標準偏差である．

$$I(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|x\,\psi+\lambda\,\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2 \mathrm{d}x \qquad (\text{任意の } \lambda \text{ に対して } I(\lambda)\geqslant 0)$$

を考える．展開して部分積分をすれば，つぎつぎに

$$I(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}|x\,\psi|^2\mathrm{d}x+\lambda\,\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\,x\,\psi+x\,\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x+\lambda^2\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*x^2\psi\,\mathrm{d}x-\lambda\,\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi\,\mathrm{d}x-\lambda^2\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\mathrm{d}x$$

となる．これから，ψ が 1 に規格化されていると考え，§5 の結果を使うと

$$I(\lambda)=\langle x^2\rangle-\lambda\,\hbar+\lambda^2\langle p^2\rangle \tag{29}$$

が得られる．λ の 2 次式 $I(\lambda)$ は正（または0）に符号が定まっているから，その判別式 $\hbar^2-4\langle p^2\rangle\langle x^2\rangle$ は必ず負（または0）でなければならない．ゆえに

$$\langle x^2\rangle\langle p^2\rangle\geqslant\frac{1}{4}\,\hbar^2. \tag{30}$$

条件 (30) は上記の条件 (28) より制限が弱い．しかし，すこし異なる $I(\lambda)$ の式，すなわち $I(\lambda)$ の定義において x を $x-\langle x\rangle$ に変え，$\hbar(\partial/\partial x)$ を $\hbar(\partial/\partial x)-\mathrm{i}\langle p\rangle$ に変えた式（あるいは同じことであるが，$\psi(x)$ を $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle p\rangle x/\hbar}\,\psi(x+\langle x\rangle)$ に変えた式）から出発して同じ計算をすることができる．結果は (29) に似て

$$I(\lambda)=(\varDelta x)^2-\lambda\,\hbar+\lambda^2(\varDelta p)^2\geqslant 0$$

となる．条件 (28) はこの λ の 2 次式の判別式がけっして正にならないことを表わしている．　（証明終）

ここで述べた証明は 3 次元空間の 1 粒子にもそのままあてはまる．波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ は 3 次元空間の関数であり，証明のなかに導入される積分は，x 軸だけを対象とする代りに，空間の三つの次元を対象とする．この積分に対してなされた取り扱いがすべて成り立つことを読者は容易に確かめられよう．同様に，標準偏差の定義 (27) もたやすく一般化される．こうしてハイゼンベルクの不確定性関係

$$\varDelta x\cdot\varDelta p_x\geqslant\frac{1}{2}\,\hbar,\quad \varDelta y\cdot\varDelta p_y\geqslant\frac{1}{2}\,\hbar,\quad \varDelta z\cdot\varDelta p_z\geqslant\frac{1}{2}\,\hbar \tag{31}$$

が得られる．

§9．一般化：共役変数間の不確定性関係

R 次元量子系という一般の場合にも同じ関係が見いだされる．§6 の記号を使おう．定義 (27) を拡張して，q_i と p_i の不確定さをそれぞれの統計的分布の標準偏差

$$\varDelta q_i=\sqrt{\langle q_i^2\rangle-\langle q_i\rangle^2},\qquad \varDelta p_i=\sqrt{\langle p_i^2\rangle-\langle p_i\rangle^2}$$

によって測る．前節の証明はそのまま繰り返すことができ，その結果として（デカルト系の）共役変数のあいだの不確定性関係

$$\Delta q_i \cdot \Delta p_i \geqslant \frac{1}{2}\hbar \qquad (i = 1, 2, \cdots, R) \tag{32}$$

が得られる．

§10. 時間－エネルギーの不確定性関係

位置－運動量の不確定性関係が存在する根本的理由は，運動量が，一つの定数を除いて平面波の固有の波数として定義されるという事実と，ごく厳密に言えば，平面波は全空間にひろがっているという事実である．空間の正確な1点に運動量を局在させようとすることは，平面波を局在させるということにほかならない．

運動量が波数であり，空間内に局在させることができないのと同じように，エネルギーは振動数であり，時間のなかに局在させることができない．それゆえ，相対性原理が示すように，先に論じた位置－運動量の不確定性関係に似た時間－エネルギーの不確定性関係

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar \tag{33}$$

が存在する．しかしながら，この関係の物理的解釈はかなり違う．位置－運動量の不確定性関係においては，位置および運動量の変数がまったく対称的な役割を演じ，それらのうちの一つは，どちらでも，与えられた時刻に測定することができる．測定結果の統計的分布，したがって不確定さ Δq_i, Δp_i は，すべてこの時刻において波動関数のとる値から導き出される．これに反して関係（33）では，エネルギーと時間が根本的に異なる役割を演じる．エネルギーEは系の力学変数であるが，時間 t はパラメータである．関係(33)により，この力学変数がとる値の不確定さ ΔE は，その系の変化のリズムに固有な時間の長さ Δt と関係づけられる．

この議論を始めるにあたってまず自由粒子の挙動を調べる．単色光平面波 $e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$ は，はっきり決まった運動量 $\hbar \boldsymbol{k}$ とエネルギー $\hbar\omega$ をもつ粒子を表わす．平面波の重ね合わせによって，第2章 (11) のように，波束をつくることができる．簡単のため，1次元の波束を考え，具体的に考えられるように，先に調べた階段型信号のような一連の波動を思い浮かべる．その長さを Δx で表わし，群速度を v で表わす．波束は x 軸に沿って速さ v で移動する．しかし，それが軸上の与えられた1点を通る時刻を正確に決めるわけにはゆかず，不確定さ

$$\Delta t \simeq \frac{\Delta x}{v}$$

を伴う．さらに，この一つながりの波は運動量空間においてある幅をもっており，このことから粒子のエネルギーの値には不確定さ

$$\varDelta E \simeq \frac{\partial E}{\partial p}\varDelta p = v\varDelta p$$

が生じる．上の二つの式から

$$\varDelta t\cdot\varDelta E \simeq \varDelta x\cdot\varDelta p$$

が導かれ，これに運動量－位置不確定性関係を適用すれば，関係（33）を得る．これは粒子のエネルギー・スペクトルの幅 $\varDelta E$ と，与えられた1点をその粒子が通過する時刻を測る精度 $\varDelta t$ との積に下限を与える．

上の証明はゆるやかに変わる場における波束の場合にも容易に拡張されるが，もっと一般の場合には成り立たなくなる．この一般の場合に（33）のような関係を得るためには，波動関数の時刻に対する依存関係を考慮しなければならない．

最も簡単なのは量子系がはっきり決まったエネルギーをもつ場合である．すでに知っているように（第2章，§16を参照），与えられたエネルギー $E=\hbar\omega$ をもつ量子系の波動関数は，時刻の関数として指数因数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ に比例して変わる．一例として，力の場のなかの1粒子の場合を考えよう．その量子状態がエネルギーのはっきり決まった値 $E=\hbar\omega$ に対応するならば，その波動関数は $\varPsi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ と書かれる．その結果，この粒子の位置の分布 $P(\boldsymbol{r})=|\phi(\boldsymbol{r})|^2$ は時刻に無関係である．容易にわかるように，運動量の分布もまたこの性質をもつ．したがって（位置または運動量の）測定をこの系に行なったときの結果は，測定がなされた時刻にはよらない．このことを簡潔に表わすために，このような系の物理的性質は時間に無関係である，あるいはまた，系は**定常状態**にあるという．

今度は粒子の量子的状態が，それぞれエネルギー E_1 と E_2 をもつ二つの定常状態の重ね合わせであると仮定しよう．その波動関数は

$$\phi_1(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}+\phi_2(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}$$

という形をしており，分布

$$P(\boldsymbol{r},t)=|\phi_1(\boldsymbol{r})|^2+|\phi_2(\boldsymbol{r})|^2+2\,\mathrm{Re}\,\phi_1^*\phi_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_1-E_2)t/\hbar}$$

は時間の経過とともに（両端の値 $(|\phi_1|-|\phi_2|)^2$ と $(|\phi_1|+|\phi_2|)^2$ のあいだを）振動し，その周期は

$$\tau=\frac{h}{|E_1-E_2|}$$

である．運動量の分布も同じ性質をもつ．

τ はそれゆえ，この系の物理的性質の時間的な変化に固有な一つの時間の長さである．二つの異なる時刻 t_1，t_2 に行なわれる測定の結果——もっと正確に言えば，測定結果の統計的分布——は，差 $\Delta t=|t_1-t_2|$ が τ にくらべて小さいときには実際上同じになる．言葉をかえると，時間が Δt だけ経過するあいだにこの系の物理的性質が目に見えて変わるためには，Δt とエネルギーの不確定さ $\Delta E=|E_1-E_2|$ との積が，$\hbar$ 程度のある量より小さくないことが必要である，すなわち $\Delta t\cdot\Delta E\gtrsim\hbar$．この形に言い表わすと，系の状態が任意個数の定常状態の任意の重ね合わせであるときにも，この結果が成り立つ．それゆえ，これはまったく一般的である．これについての詳しい証明はのちに（第8章，§13）与えられよう．

関係式 (33) の重要な応用は放射性系（放射性核，原子の励起状態，不安定な素粒子など）の平均寿命と幅の関係である．このような系は定常ではない．それははっきり決まった一つのエネルギーの値に対応せず，ある幅 ΔE をもつエネルギー・スペクトルに対応する．ここでは，平均寿命 τ が先に述べた固有な時間の長さの役割を演じる．この系の性質の顕著な変化を観察するためには，この程度の長さの時間だけ待たなければならない．したがって

$$\tau\cdot\Delta E\simeq\hbar.$$

(33) のもう一つの結果は，一般にエネルギーの測定に関することである．測定の精度 ΔE は測定に要する時間 Δt と関係 (33) によって結ばれている．たとえば，水素原子の最初の励起状態の励起エネルギーを測る場合に，これに一定速度の電子を当て，それによって生じる非弾性衝突のあいだに電子が失うエネルギーを測ることができる．測定をつづける時間は少なくとも衝突の時間，すなわち電子を表わす波束が水素原子のいる場所を通過するための時間 Δt に等しい．測定誤差は少なくとも入射電子のエネルギーの不確定さ ΔE に等しく，まさしく $\Delta t\cdot\Delta E\gtrsim\hbar$ となる．

§11. 光子に対する不確定性関係

物質粒子の系における不確定性関係は，波動的であり粒子的である物質の二面性に由来する．同じ理由により，光子の場合にも類似の関係が存在する．しかしそれを定式化するとき，気をつけなければならないのは，一つの物理系に含まれる光子の個数は一般にはっきり決まった量でないということ，また厳密に言えば，一つの決まった光子の行動を追うということは，それがまったく相互作用を受けていないときを除いては，考えることができないということである．

この制限の下に一つの自由光子を，速さ c で伝わる単色光平面波を重ね合わせてつくら

れる波束によって表わすことが許される[6]. たとえば，絞りを備えたスクリーンを照らすとき，ある時間 Δt のあいだだけ絞りを開くことによって，一つの光信号がつくられ，たまたまそれがただ一つの光量子から成る場合もありうる．この光子は一つの波束で表わされ，その三つの軸方向へのひろがり Δx, Δy, Δz は絞りの大きさとその開放時間によって決まる．この波束は単色光波の重ね合わせである．それは先に調べた波束の性質をすべてもっている．それははっきり決まった運動量とエネルギーをもつ光子を表わすのではなく，その運動量の成分とエネルギーとはある有限な範囲，すなわち Δp_x, Δp_y, Δp_z および ΔE にひろがっている．

これらすべての量は関係

$$\Delta x\cdot\Delta p_x \gtrsim \hbar,\quad \Delta y\cdot\Delta p_y \gtrsim \hbar,\quad \Delta z\cdot\Delta p_z \gtrsim \hbar,\quad \Delta t\cdot\Delta E \gtrsim \hbar$$

を満たす．

これらの関係から，このような光子と物質との相互作用の機構についていくつかの結果が導かれる．たとえば，原子による光子の吸収（光電効果）の際，原子に移されるエネルギーの不確定さ ΔE と，このエネルギーが移される時刻に関する不確定さ Δt との積は，少なくとも $\hbar$ の程度である．逆に励起状態にある原子が光子を放出して励起を失うとき，この遷移が生じる時刻にはある不定さが伴い，それはほぼこの励起状態の平均寿命 τ に等しい．放出される光子は空間的なひろがり $c\tau$ をもつ波束によって表わされ，その結果，エネルギーに対する分散 ΔE は $\tau\cdot\Delta E \simeq \hbar$ のようになる．この結果は実験にもよく一致している．これはまた，前に論じた平均寿命と幅の関係から出発しても得られるものであった．この際，エネルギーの保存法則にしたがって，放出される光子（終りの状態）のエネルギーにおける分散は，励起されている原子（初めの状態）のエネルギーに対する分散に等しいはずであることに注意すればよい．

III. 不確定性関係と測定の機構

§12. 測定操作中の制御できない乱れ

今後はもっぱら位置－運動量不確定性関係について集中的に論じる．この関係に入ってくる偏差 Δx, Δp は，さきに確率を定義する際に述べた条件の下で行なわれる測定に関係したものである．これらを普通の測定誤差と混同してはならない．後者は測定装置がけっして完全ではなく，測られる量を無限に精密には決定できないということによるもので

(6) 説明を簡単にするために，光の偏り（偏光）の存在には触れないでおく．これを考慮に入れると，光子に内部自由度を与えなければならない．

ある．上の議論ではいつもこの種の誤差は無視されるものとしてきた．

そこで，先に定めた統計的解釈を認めるとき，測定の操作はどうなるかを細かく調べよう．たとえば，一つの量子系の粒子の位置座標の測定を考え，系の力学的状態は波動関数 Ψ によって表わされているものとする（今後は簡潔に，この系は状態 Ψ にあるということにする）．われわれは，配置された装置が限りなく正確であると仮定する．それゆえ，この装置の応答を精密に予言することが不可能であるということは，装置の不完全さによるものではない．一般に状態 Ψ は x の正確な一つの値に対応するものではなく，与えられた x の値の一つ一つに対応する力学的状態の重ね合わせである．測定操作の直後においては，この系が一つの力学的状態にあると断言することができ，この状態における座標 x は，測定装置によって示される正確な値 x' をとる．このような状態が波動関数 Ψ によって表わされないことは確かである．測定装置の干渉によって，測定される系の力学的状態は変えられる．さらに，測定操作中の系の乱れは，ある程度までは制御不可能である．という意味は，測定操作のあとに系の状態がどうなるかを正確に予想することはできず，ただこの系が，座標 x のあれこれの値 x' に対応する力学的状態になる確率だけがわかるということである．

測定操作の過程で系に乱れが起こるということは，それ自体何も驚くべきことではない．測定を行なうためには，なんらかの方法で系を適当な測定装置と相互作用させる必要がある．測定装置はこれによってある変化を受ける．装置の応答すなわち測りたい物理量のとる値を決定するのはこの変化であるから，この変化の果たす役割は本質的である．それと引きかえに，系自身もまた変えられることは避けられない．

巨視的現象のスケールでは，いつでも測定装置によって系におよぼされる擾乱作用が無視できるか，または少なくとも十分な精度で知られるように，事を運ぶことができる．この点を実例によって明らかにしよう．巨視的な物体の位置を決めるために，一組のレンズを使ってその像を写真乾板上につくることができる．物体の力学的状態は，測定の過程でそれが光にさらされるということ（輻射圧）自体によって，変えられないわけにはゆかない．入射光が連続波（数多くの光子がある）とみなされるような古典的近似においては，この変化は原則として正確に計算される．十分感度のよい写真乾板を使えるということにすれば，物体の照明を限りなく弱くし，それによってこの変化をいくらでも小さくすることもできる．

この議論は明らかに，古典的近似の極限においてしか正しくない．実際には，相互作用がとびとびの量子によって行なわれるから，測定装置から対象物への作用を限りなく小さくすることはできない．物体による光量子の回折の角度は，正確には定められない．言いかえると，回折の過程で与えられる運動量を確かめることはできないものと考えられる．

それゆえ位置の測定に伴って，物体の運動量には確かめることのできない変化が生じる（この効果の半定量的な分析は，§ 13 で与えられる）．巨視的なスケールではこの種の変化をまったく無視することができるから，古典理論では，一つの物理系のすべての力学変数を同時に，いくらでも小さい誤差で，測定できるということを議論の余地なく承認し，各瞬間にこれらすべての変数がとる値を正確に与えることによって，この瞬間における系の力学的状態を定める．微視的現象の精度のスケールでは，この前提は実験的な根拠を失うので，捨てなければならない．その代りに量子論では，測定中に物理系の受ける予想も制御もできない乱れがいつも十分大きいために，ハイゼンベルクの不確定性関係がつねに成り立つことを承認する．たとえば，先に考えた x の測定において，系は状態 Ψ から状態 Ψ' に移る．すでに述べたように，状態 Ψ は一般には，x の一つの正確な値にも，p の一つの正確な値にも対応せず，x という量の正確な測定が行なわれた場合には x のいろいろな値を得る確率分布 $P(x)$ を与え，p の正確な測定が行なわれた場合には p のさまざまな値を得る確率分布 $\Pi(p)$ を与えるようなものである．新しい状態 Ψ' には新しい分布 $P'(x)$ と $\Pi'(p)$ が対応する．特に，これらの分布に関する偏差 $\Delta' x$, $\Delta' p$ は関係 $\Delta' x \cdot \Delta' p \geqslant \hbar/2$ を必ず満たす．特に x の測定が限りなく正確（$\Delta' x = 0$）ならば，量 $\Delta' p$ は無限大でなければならない．この結果はしばしば，つぎのように言い表わされる．位置の変数 x の不確定さを減らそうと思えば，少なくともそれだけ運動量の変数 p の不確定さを増さねばならず，またその逆も正しい．

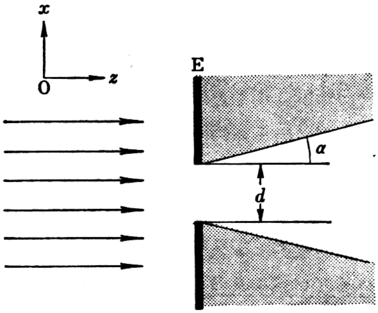
われわれはいくつかの測定の例を調べ，測られる系の受ける乱れがいつも実際十分に大きく，ハイゼンベルクの不確定性関係がけっして誤りに陥らないことを示すであろう(7)．

§ 13. 位置の測定

a）絞りの利用．

等速度の電子の平行なビームを考える(*)．このビームの伝播方向 Oz に垂直な一つの方向 Ox に沿って，電子の位置を決めてみよう．このためにビームの進路にスリットのある

(7) このことは，荷電粒子を観測するための写真乾板あるいはウィルソンの霧箱の場合のように，一つの粒子の《軌道》をはっきりさせる装置において特によく見られる．たとえばウィルソンの霧箱では，この粒子が径路にあるいくつかの原子をイオン化し，これらのイオンが凝集の中心となってそのまわりに形づくられる小滴が見える．それゆえ粒子の位置は，少なくともイオン化原子の半径に等しい（実際はそれよりずっと大きい）不確定さ Δq を伴って得られる．一方，測定装置との相互作用すなわち粒子により原子がイオン化される過程において，粒子は予想も確認もできない運動量の変化 Δp を受け，その大きさは $\hbar/\Delta q$ 程度である．粒子の《軌道》はそれゆえ精度の限界 $\Delta q \cdot \Delta p \simeq \hbar$ のなかで観察される．↗



4・2 図　スリットによる位置の測定

ついたてを置く（4・2 図）．スリットの幅を d とすれば，このスリットを横切る電子の位置は精度 $\Delta x = d$ で定められる．一方，この電子は波長 $\lambda = h/p$ のド・ブロイ波で表わされる．スリットの通過には回折効果が伴い，そのためビームはある角 α だけ開くが，その大きさは

$$\sin\alpha \simeq \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{p\cdot\Delta x}$$

程度である．

その結果 Ox 方向の電子の運動量に $\Delta p_x = p\sin\alpha$ の散らばりが生じ，まさに

$$\Delta x\cdot\Delta p_x \simeq h$$

が得られる．電子の（Ox に沿う）運動量は，測定操作の前には完全にわかっている（$p_x = 0$）と仮定しても，この測定操作の過程（スリットの通過）で，$\hbar/\Delta x$ 程度の大きさだけ，制御できない仕方で乱されている．

ここで，測定のあいだにスリットから電子に移される運動量が，実際に $\hbar/\Delta x$ よりよい精度では決められないということを確かめるのはたいせつである．そうでなければ上の議論が意味を失うからである．実際，位置の測定を行なうためには，スリットを動かないように保たなければならず，（Ox に沿う）その位置はある精度 δx で知られていなければならない．ここで δx は裂け目の幅よりもずっと小さい量である：$\delta x \ll \Delta x$．しかしスリットも電子とまったく同様に量子的物体である．それゆえその運動量は δp よりよい精度で定めることはできない．そこで

$$\delta p \simeq \frac{\hbar}{\delta x} \gg \frac{h}{\Delta x}$$

が得られる．

とはいえ，スリットが十分重いときには，測定のあいだ中実際には動かない．それゆえ，この制限は測定操作そのものを妨げない．しかし絞りの運動量の変化を δp よりよい精度で，まして $h/\Delta x$ よりよい精度で決めることは明らかに不可能である．

この議論から重要なことが明らかにされる．測定装置は量子的物体であって，それ自身もまた不確定性関係を満たすということを承認しなければならない．これは不確定性関係

↘(*)［訳注］ faisceau を訳せば束となるが，電子線とか陰極線という言葉は使っても，電子束とはふつう言わないので，英語を借用してビーム (beam) と呼ぶことにする．ビームも，すぐつぎにあるスリット（細い裂け目）も，物理学ではふつうに使われている言葉である．

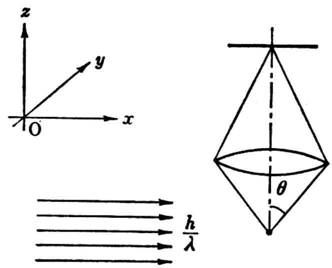
がまったく普遍的な性格をもっていることを前提にしている．もしそうでないとすれば，量子論の物理的解釈を根本的に改めなければならない．

b）顕微鏡の利用

対象の位置を測る方法のうちで，スリットの利用が最も直接的であることに疑いはない．これほど直接的ではないが同じように有効な方法は，その対象に光を当て，その像を顕微鏡によって観測することである．そこで，顕微鏡で観測することによって電子の位置 x を決めることを考える（4·3図）．測定の精度は，各点の像が有限なひろがりをもつ回折の斑点であるということによって制限される．この斑点のひろがりに基づいて測定の精度 Δx を評価すると，

$$\Delta x \simeq \frac{\lambda}{\sin\theta}$$

を得る．ここで λ は用いられる光の波長であり，θ は電子によって散乱し顕微鏡内に焦点を結ぶ光束の散乱角の半分である．一方，光の散乱はとびとびの量子によって行なわれ，完全に確かめることの不可能な運動量の移行を伴う（コンプトン効果）．この効果は散乱光がただ一つの光子を含むとき最小である．この場合の運動量ははっきり決まった大きさ $p=h/\lambda$ をもつが，しかしその伝播方向は角 θ の範囲内で不定である．それゆえ電子に移される運動量は正確には知られず，不確定さ



4·3 図　顕微鏡による位置の測定

$$\Delta p \simeq \frac{h}{\lambda}\sin\theta$$

をもつ．位置の測定が正確になるほどこの効果は大きくなり，つねに $\Delta x\cdot\Delta p \simeq h$ が成り立つ．

x に関する精度は回折斑点のひろがりによって与えられるのではなく，この斑点の中心を定めるときの精度によるという異論が出るかも知れない．この精度は，斑点をつくるのにあずかる光子の数 N が大きくなるにつれてよくなる．統計の法則によれば，こうして計算するときの x に関する誤差は，上に計算した誤差を $\sqrt{N}$ で割ったものになる．

$$\Delta x \simeq \frac{1}{\sqrt{N}}\frac{\lambda}{\sin\theta}.$$

しかしながら，各光子から移される運動量が不確定さ $(h\sin\theta)/\lambda$ をもつので，N 個の光子から移される運動量の不確定さは $\sqrt{N}$ 倍大きくなり（二乗誤差の和），したがって

$$\Delta p \simeq \sqrt{N}\,\frac{h}{\lambda}\sin\theta.$$

その結果として$\Delta x \cdot \Delta p \simeq h$が得られる.

§14. 運動量の測定

同様に，先験的には粒子の運動量をいくらでも精密に測定することができるけれども，その測定操作にはつねに乱れが伴い，これによって位置座標の不確定さが増加し，その結果，不確定性関係はやはり必ず満たされるようになる．このことを二つの例について示そう．

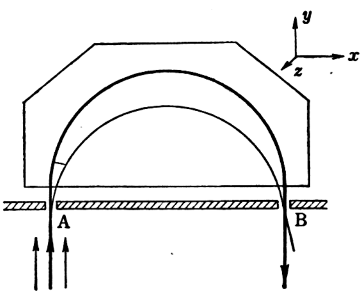
a）磁場における偏向

荷電粒子の運動量はふつう一様な磁場における偏向（方向の変化）によって測られる．狭義の運動量 p（質量と速度の積）はよく知られた関係

$$p = \frac{e}{c}\mathscr{H}R$$

によって，粒子の軌道の曲率半径 R と結びつけられる．ここで，$\mathscr{H}$ は磁場の強さであり，e は粒子の電荷である．

この方法による電子の運動量の測定を吟味しよう．図4·4は測定装置の概念図を示す．



4·4 図　磁場における偏向による運動量の測定

電子は絞り A を通って磁石に入り，180° の偏向（この偏向角は議論を簡単にするため選んだものである）を受けたのち，絞り B を通って磁石を離れる．測定開始のすぐ前の瞬間（すなわち絞り A を通る直前）には，伝播の方向は完全に定められており（Oy 方向），この方向における電子の座標 y は完全に知られている（$\Delta y = 0$）と仮定する．この初期条件（$p_x = p_z = 0$, $y = y_A$）は，《露出時間》の十分短いシャッターのついたコリメーターを使えば，原理上つねに実現される．曲率半径 R は二つの絞りの距離の半分に等しい．これらの絞りの幅がそれぞれ $2d$ と $2d'$ ならば，R は誤差 $d+d'$ で測定される．それゆえ電子の運動量は

$$\Delta p = \frac{e}{c}\mathscr{H}(d+d') = \frac{p}{R}(d+d')$$

の精度で知られる．

ここで測られている量は Oy 軸に沿う運動量の成分である．一度測定が行なわれると，電子の y 座標には不確定さ Δy が生じ，$\Delta y \cdot \Delta p \gtrsim h$ となることを示そう．ここに入ってくる量子効果は，電子波が絞り A を通過する際の回折である（この問題では，絞り B

による回折は何の役割をも果たさないことを読者は確かめられよう). この効果がなければ, 磁石に入るときの運動量の方向は Oy の方を向いており, 電子は A から B へきわめて正確に半円を描き, A から B までの通過時間は p の値に関係なく $\pi mc/e\mathcal{H}$ に等しいはずである (m は電子の質量). この効果があるために, 磁石に入るときに運動量が Oy 軸とつくる角には, $\alpha \simeq \lambda/d = h/pd$ だけ不定さが生じ, 電子の軌道 (すなわち幾何光学的近似における軌跡) は誤差 2α で定まる円弧である. 電子が B に到達する時刻は正確な形で定まるものではなく, 不定量 $\Delta t = 2\alpha mc/e\mathcal{H}$ を伴う. 不確定さ Δy は p/m 倍大きく,

$$\Delta y \simeq 2\alpha \frac{pc}{e\mathcal{H}} \simeq 2h \frac{c}{e\mathcal{H}d}$$

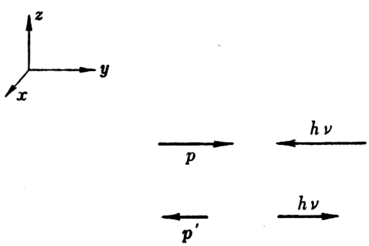
である. したがってわれわれは

$$\Delta y \cdot \Delta p \simeq 2h\left(1 + \frac{d'}{d}\right)$$

を得る.

b) 光子との衝突.

運動量を測定するもう一つの方法は, 問題の粒子に初期運動量が完全にわかっている他の粒子, たとえば光子を衝突させ, 衝突の際第二の粒子に移される運動量を測ることである. もう一度前の問題の電子にもどり, 初期条件 $p_x = p_z = 0$, $y = y_A$ によって特徴づけておく. その運動量 p_y を決めるために, これを完全な単色光で照射し, この光の振動数を ν とし, 伝播方向を y 軸に平行であるとする. この光子の一つがたまたまコンプトン衝突を受け, われわれはその終末運動量を測る. 簡単のため, これもまた Oy に沿う (逆向きの) 方向をもつと仮定する (4・5 図). 衝突後の光子の振動数を ν' とする. コンプトン効果の理論によって, 電子の初期運動量 p と終末運動量 p' とを振動数 ν と ν' の関数として表わすことができる. われわれは非相対論的近似の条件 ($p, p' \ll mc$ と $\nu, \nu' \ll mc^2/h$) が満たされていると仮定する. すっかり計算すると,



4・5 図　光子とのコンプトン衝突による電子の運動量の測定. 衝突の概念図.

$$p = mc\frac{\nu'-\nu}{\nu'+\nu} + \frac{h}{2c}(\nu'+\nu), \qquad p' = mc\frac{\nu'-\nu}{\nu'+\nu} - \frac{h}{2c}(\nu'+\nu)$$

となり, これらの量の決定の精度は関係式

$$\Delta p \simeq \Delta p' \simeq mc\frac{\Delta\nu'}{\nu'+\nu}$$

によって ν' の決定の精度と結びつけられる．

測定後の電子の位置 y を計算するには，初期時刻において $y=y_A$ であることと，電子がコンプトン衝突の前には速さ p/m で，それ以後は速さ p'/m で動くことを考えればよい．散乱光子の運動量と位置が同時にごく正確に測定されるとすれば，衝突の起こった時刻は正確な形で定められ，p と y に関する不定さは同時にきわめて小さくなるであろう．読者は容易にこう信じるかもしれない．ところが，実際には，ν' の測定は振動数の測定である．これが精密になればなるほど，与えられた点を光子が通る時刻に関する不定さは大きくなり，特に衝突の時刻に関する不定さ Δt が大きくなる：$\Delta\nu'\cdot\Delta t\gtrsim 1$．さて，衝突後の電子の位置に関する不確定さ Δy は少なくとも Δt と速さの変化との積に等しい．したがって

$$\Delta y \gtrsim \frac{|p-p'|}{m\Delta\nu'}=\frac{h}{mc}\frac{\nu+\nu'}{\Delta\nu'}$$

となり，これから

$$\Delta y\cdot\Delta p \quad および \quad \Delta y\cdot\Delta p' \gtrsim h.$$

この測定操作においても，前の場合と同様に，測られる量 p_y そのものが測定操作の過程で変化を受ける．この変化を，測定の過程でこの系が受ける予見も確認もできない乱れと混同してはならない．事実，この変化は正確に知られるかまたは少なくとも，衝突前後の p_y の値 p と p' が同じ精度で知られ，この精度はいくらでもよくすることができる．これに対して，測定操作の過程で粒子が受ける乱れ（運動量とエネルギーの移行が生じる時刻についての不確定さ）を予言し，確かめることができないために，一度測定が行なわれると，ある不確定さ Δy を伴わずに y を知ることはできず，p の測定が精密になるほど Δy は大きくなる．

不確定性関係の普遍的性格がもつ重要な意義をもう一度強調しておこう．もしも光子に対する作用量子の値が $\hbar$ よりずっと小さい $\hbar'$ であったとしたら，実際はどうなるであろうか．明らかに，測定 b）に関するわれわれの議論は，すべての式のなかの $\hbar$ を $\hbar'$ に置き換えるだけで，他に何の修正をも加えずすべてそのまま繰り返すことができる．このことから，不確定さの積 $\Delta y\cdot\Delta p'$ に対して $\hbar'$ 程度の値が考えられ，その結果 $\Delta y\cdot\Delta p'\simeq\hbar'\ll\hbar$ となる．不確定性関係が破れ，今まで述べてきたすべての統計的解釈が実験と矛盾することになる．

ここで論じた運動量の二つの測定は必ずある遅れを伴う．しかしこの遅れは，p_y の測定精度に影響を与えることなく，ある範囲に縮小することができる（第一の場合では $\mathscr{H}$ を増し，第二の場合では ν を増せばよい．問題7を参照）．ともかく，§2と§5で定義し

た確率は，与えられた時刻 t における波動関数によって計算される．測定が瞬間的でない以上この時刻 t を正確に定めなければならない．t は測定の始まる時刻であり，§2 で定められた確率法則（式（6））は運動量 p_y すなわち測定前の運動量に関するものである．

IV. 量子論における現象の記述．相補性と因果律

§15. 統計的解釈から生じる諸問題

波動関数による量子系の表現がその抽象的性格によって抵抗を感じさせ，これから与えられる統計的解釈が直観的に把握しがたいことは確かである．しかし，微視的現象をもっと具体的な，もっと直観に訴え易い形に表現しようとすると，つねにある矛盾に遭遇する．

たとえばヘリウム原子を考えよう．議論を複雑にしないために，ヘリウム核は無限に重く動かないものと仮定し，波動関数 $\Psi(r_1, r_2 ; t)$ によって表わされる2電子系としてこの原子を扱う．これについて考えられる最も簡単なイメージは，重い核のまわりで簡単なまたは複雑な運動を行なう二つの〔古典的〕粒子としての電子の像である．ということは，関数 Ψ によって与えられるのは，位置の測定のときには位置の統計，運動量の測定のときには運動量の統計だけであるが，実際の各電子ははっきり決まった軌道をもつと考えることを意味する．しかし，原子の力学的状態が波動 Ψ によって完全に定められるということを認める以上，このような原子の粒子的表現は部分的には不正確である．逆に，これら二つの電子を，核のまわりの空間における電気の連続的な分布，もっとうまく言えば，荷電した連続波のように想像することもできる．しかしこのイメージ，これもまた困難をひき起こす．第一に波動 Ψ は配置空間(*)で定義され，ふつうの空間で定義されていない．それゆえ，これを先に述べた具体的な波と同一視することはできない．この具体的な波の正確な定義は今までのところまだ解の求められていない問題である．第二に，連続波のイメージはある種の現象と結びつかない．たとえば原子のイオン化においては，個々の粒子の存在が示され，それらはある程度まで位置づけられる．

もちろん，矛盾のない具体的な微視的現象の表現が定式化できないという証明はない．しかしながら事実は，誰もそれに成功していないということである．さらに十分考慮に入れなければならないのは，多かれ少なかれ抽象的な物理理論の諸概念が具体的な言葉によって説明されることを要求するような論理的必然性は何もないということである．具体的なものに対するわれわれのすべての直観，すべての感覚は日常的な経験に基づいており，

(*) [訳注] この場合には，x_1，y_1，z_1，x_2，y_2，z_2 という6個の座標で定められる6次元空間．

どんな現象であろうとその具体的な記述を行なうために用いる言葉は，この経験から引き出されるものである．微視的な物理の現象のように経験からかけはなれた現象に関してこのような言葉が矛盾なく用いられることを示すものは何もない．この種の困難の例を最初にもたらしたのは微視物理学ではない．相対論のいくつかの結果もまた同様にわれわれの直観に反する(8)．座標系に対する速度が c に近いとき，長さの縮む現象や時間の遅れる現象がその例である．それゆえ，微視的現象について脳裏に描こうとする具体的なイメージをどこまでも押しひろげてゆくと，何らかの矛盾または何らかの背理が生じるとしても，驚くにはあたらない．

これに関連して，量子論において定数 $\hbar$ が演じる役割と，相対論において定数 c が演じる役割とのあいだにある平行性に注意することは示唆に富んでいる．c が有限であり無限ではないという事実は，同時性の概念を改めさせ，それによって，ニュートン力学の成り立つ範囲を制限した．同じように，$\hbar$ が有限であり，0ではないという事実は，同時測定の概念を改めさせ，古典論の成り立つ範囲を制限した．われわれの日常経験がわれわれに示唆する具体的なイメージは，c が無限大のように思われ，$\hbar$ が0のように思われる世界の像であって，これらの近似の一つが成り立たなくなる範囲までそのままもち込むことはできないものである．

それゆえ量子論に諸現象の具体的でつじつまのあった表現がないということを，この理論の欠陥と考えることはけっしてできない．しかしこのことは，別の見地からの批判を招いている．

問題は，完全に申し分のない理論に対して当然期待される諸条件を，量子論における現象の記述が十分に満たすかどうかを知ることである．一つの理論に対してまず要求されることは明らかに，その理論による予想が実験的観測と一致するということである．少なくとも原子と分子の物理学の領域において，量子論がこの条件を満たすことは確かである．しかし，これこれの実験をしたときに何が観測されるかを予想するだけに留まるならば，その物理理論は完全であると称することはできない．すべての科学的な仕事を始めるに当たって，自然はわれわれの感覚器官による知覚や観測手段に無関係な客観的実在性をもつということを基本公理として認める．物理理論の目的はこの客観的実在について明確な報告を行なうことである．

さて，量子論のすべての結果はつねにつぎのような形で述べられる：《これこれの観測をするならばこれこれの結果を得る》．それゆえ，量子論が客観的実在の完全な記述を十分に提供しているかどうかを問うことは正当である．

---

(8)　人間の直観と物理学の発見とが渡りあう機会は，別に相対論から始まったわけではない（“それでも地球はまわる” など）．

この疑問は，量子論による予想が統計的な性格のものであることによって，いっそう正当になる．古典論では，調べたいと思う物理系についてもっている情報が不完全であるときに，統計の言葉とその方法に訴える．古典統計学に導入された諸概念によって客観的実在の完全な記述を与えることはどうしてもできず，ただできることは，問題になっている物理系についての情報が不十分であるにもかかわらず，その系に関するいくつかの平均的性質といくつかの結果を得ることだけである．これらの結果は，特定の一つの系に厳密に適用されるものでなく，きわめて多数 $\mathfrak{N}$ の類似で独立な系に適用される．同様に，量子論も一般には，個々に取り出された系について行なわれるあれこれの測定の結果を確定的に与えるものではなく，同じ波動関数によって表わされるきわめて多数 $\mathfrak{N}$ の系について同じ測定を繰り返すときに得られる統計的分布を与えるにすぎない．

それゆえ，量子論は微視的な対象の系の統計的な集合に関する正確な記述を与えるが，個々にとり出された系の一つ一つを完全に記述すると主張することはできないという結論になりそうである．この見方によると，波動関数を知るだけでは個々の物理系の力学的状態を完全に定めるのに十分ではないことになる．それをするためには，いくつかのデータを補わなければならないであろうが，それを手に入れることは，われわれの観測手段が不十分であるために，われわれには不可能なのである．言葉を変えれば，物理系の力学的状態は，十分精密な法則によって支配されているいくつかの隠れたパラメータによって各瞬間に確定されている．与えられた測定の結果を確実に予想できないということは，単にこの隠れたパラメータの正確な値を知ることがわれわれにとっては不可能であることによる．波動関数は問題になっている系の客観的状態を表わすものではなく，むしろ不十分にしか知られない系に関してわれわれがもつ情報の全部を含む数学的対象である，ということになろう．

この意見は完全に弁護しうるとしても，量子論が自然現象の完全な記述を与えるということは，一般に認められている(9)．このための基礎となるのは，微視的なスケールの観測におけるきわめて特殊な条件に関してボーア (1927) が行なった分析と，この分析からひき出すことができた一般的な原理，相補性原理である．

§16. 微視的な現象の記述と相補性

自然現象――その客観的実在性を疑うことは，ここではまったく問題にしない――のどのような記述においても，その現象に関する観測の結果がどこかの段階で入ってくることを避けることはできない．さて，これがボーアの分析の第一点であるが，一つの現象が古

(9) 第2章の脚注 (10) を参照．

典力学からどんなにかけ離れていても，それについて報告するためには古典的な術語を用いることが必要である．事実，一つの実験を報告するということは，その実験の環境と観測の結果についてまぎれのない記述を行なうことであり，それはたとえば《このような指針がこのような目盛の上でこのような時刻にこのような点にとまった》と述べることである．ここで強調したい点は，観測者の側からけっして不確定の要素が入ってこないように，まぎれのない言葉を用いる必要があるということである．実験は再生されるものでなければならず，その経過は，それを行なう観測者と完全に無関係でなければならないから，上のことはどうしても避けられない．

しかし，微視的スケールにおいては，自然現象とこれを観測する手段とのあいだに，観測という通常の概念が要求するような明確な区別をすることができない．対象と観測手段を分離した総体として記述することが正当とされるのは，量子$\hbar$が無限小とみなされるような測定の場合だけである．このことは問題の現象の古典的言語による分析に一つの制限を与える．この制限を越えて分析を押し進めようと企てると，つねに実験装置の変更が要求され，それがまた対象と観測手段とのあいだに別の相互作用の可能性を生ずる．

このようなわけで，異なる実験条件の下に行なわれた観測の結果を，単独のイメージのなかにまとめることはできない．しかしながら，微視的物理学の対象の性質に関する可能な情報は，観測結果の総体だけで尽くされるという意味において，異なる手段による観測結果は相補的なものとみなされなければならない．このようなことが相補性原理の内容である．

§17. 相補変数．共立な変数

それゆえ微視的物理学における現象の記述は相補的な要素によってなされる．これらの要素は一つ一つが補いあって古典的なイメージを構成するが，それぞれ互いに両立しない実験の配置によって定められる．

与えられた位置の成分xと，対応する運動量の成分pとは，ここでわれわれが諒解した意味で相補的な要素の一対をつくる．xとpの正確な測定をするには，両立しない実験の組み立てを必要とするので，これら二つの量の同時測定は，精度の限界 $\Delta x \cdot \Delta p \simeq \hbar$ を超えて行なうことができない．これは§13と14の議論から導かれることである．xの測定とpの測定を目的とする実験の組み立ての相互に矛盾する性格は，スリットによって行なわれる電子についての測定（§13, a））を考えると特に明瞭になる．位置の測定に用いられるスリットは運動量の測定にも役立つ．そのためには，電子との衝突の過程でスクリーンに移される運動量を測ればよい．しかし《電子＋スクリーン》という全体が一つの不可分な量子系をつくり，それら二つの部分のあいだを厳密に分離することは不可能である

から，それらの相互作用はある程度以上は確認できないということを認めない限り，古典的な言葉を使って，電子（測られる系）とスクリーン（測定手段）との変化を別々に語ることはできない．x の方を精度 Δx で知ろうとすれば，スクリーンへの運動量の移行を $h/\Delta x$ よりよい精度で確かめることはできない．p の方を精度 δp で知ろうとして，運動量の移行を精密に測るために必要な実験装置をすべてスクリーンに付け加えると，スクリーンの位置を $h/\delta p$ よりよい精度で確かめることができなくなり，それだけ x についての知識が制限される（問題10を参照）．

変数 x と p は一対の相補変数をつくるという．相補性原理はしばしばもっと制限された形でつぎのように述べられる．

微視的な対象の物理的性質を古典的な用語で記述しようとすれば，いくつかの相補変数の対を使うことが必要であり，一対のうちの一方の値をよりよく定めようとすれば，必ずその代償として，他方の値を定める精度がそれだけ失われる．

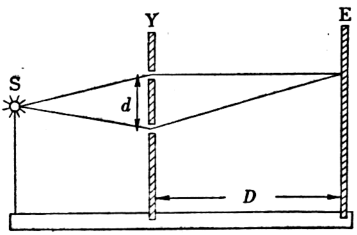
この表現は，量子力学と古典力学との相違の本質的な点，すなわち一つの量子系の力学変数をすべて同時に無限の精度で定めることはできないということを強調している．

二つの力学変数が同時に正確に決定されるとき，これらは**共立**（compatible）であるという．われわれは第5章で，まったく一般に，二つの共立な変数は交換する線形演算子によって表わされることを知るであろう．たとえば1粒子の座標 x と y は共立な変数である．特に重要なものとして考えなければならないのは共立な変数の完全集合，すなわちこれを構成する変数 a, b, c, … はどの二つをとっても共立であり，またこれらのすべてと共立な変数はいずれもこれらの変数の関数 $f(a, b, c, \cdots)$ となるような集合である．一例としてただ一つの粒子から成る量子系を考えよう．位置の3変数 x, y, z は共立な変数の完全集合をつくる．実際，これらは三つとも同時に決定される．他方，すべての力学変数は x, y, z と p_x, p_y, p_z のある関数である．量 p_x, p_y, p_z はそれぞれ x, y, z と共立でないから，x, y, z と共立な変数は p_x, p_y, p_z に無関係なもの，すなわち $F(x, y, z)$ だけである．同様にして p_x, p_y, p_z も完全集合をつくる．p_x, y, p_z もそうである（これら三つの変数の値を与えることによって §14 の例における測定前の系の力学的状態が完全に決定される）．一つの系の共立な変数の完全集合に対して行なわれる正確な測定は，この系について入手できる最大限の情報を表わす．したがってそれは力学的状態を完全に決定し，またこの状態には決まった波動関数が対応する．われわれは第5章でこの点に立ちもどるであろう（第5章，§15 と 16）．

§18. 波動－粒子二重性と相補性

相補性原理を採用すれば，波動－粒子二重性がパラドックスではなくなる．波の姿と粒子の姿は二つの相補的な姿であって，互いに相容れないような実験装置によってだけ現われる．二つの姿のうちの一方を明らかにしようとすれば，いつでも実験装置の変更が必要であり，このため他の姿を観測する可能性がすべて壊される．

たとえばヤングの回折実験を考えよう．光源 S から出る単色光の輻射は，d だけ離れた二つの孔を通ってスクリーン Y を横切り，Y から D だけへだてて置かれたスクリーン E の上に干渉縞をつくる (4･6 図)．輻射の波長を λ とすると干渉縞の幅は $\lambda D/d$ である．この実験で，光源 S とスクリーン Y と E は共通の台の上にしっかりと固定する．ところで S と E に対する Y の (Ox 方向の) 位置が干渉縞の幅よりもよい精度 δx で固定されたときだけ縞は観測される．すなわち



4･6 図　ヤングの孔の実験における粒子の形と波の形とのあいだの相補性．S—光源，Y—ヤングの複スリット，E—検出用スクリーン．図において，S，Y，E は共通の台にしっかりと固定してある．この実験装置によって干渉像は明らかにされるが，個個の光子がたどる軌道に関する情報は，同じ根拠により，全部観測から漏れてしまう．

$$\delta x < \frac{\lambda D}{d}$$

(簡単のため光源 S は実際上無限遠にあると考える)．スクリーン Y のどの孔を粒子が通ったかを知ることができれば，輻射の粒子的な姿が明らかにされる．これを知るための最も簡単な方法の一つは，通過の際スクリーン Y に移される運動量を測ることである．これは粒子がどの孔を通ったかによって，$\simeq pd/D$ だけの違いがあり，$p = h/\lambda$ は粒子の運動量である．それゆえ測定は

$$\delta p < \frac{hd}{\lambda D}$$

となるような精度 δp で行なわれなければならない．波の姿と粒子の姿を同時に明らかにするためには，これら二つの不等式が同時に満たされること，したがって

$$\delta x \cdot \delta p < h$$

となることが必要であるが，観測装置も量子的なものであり，不確定性関係を満たす以上，これは不可能である．粒子の姿を明らかにしようとすれば，いつもこのように，干渉を抑止する結果になる (問題11を参照)．

§19. 相補性と因果律

量子論における現象の記述に関する特殊な条件によって，因果律の成り立つ範囲が制限され，この理論による予想が統計的性格をもつ理由も説明される．

因果律がまったく厳密に適用されるのは孤立系だけである．与えられた時刻におけるこのような系の力学的状態は，その時刻における波動関数によって表わされる．与えられた初期時刻 t_0 における波動関数の値 $\psi(t_0)$ とその後のすべての時刻における波動関数の値 $\psi(t)$ とのあいだには一つの因果関係，シュレーディンガー方程式によって表わされる関係が存在する．しかしながら，この系に関して一つの観測をしようとすると，この系に対する観測手段の反作用を無視することはけっしてできない．さらに，観測される系と観測手段のあいだに明確な境界はないから，この反作用はある程度までしか予想も確認もできない．全体が一つの不可分な量子系をつくり，観察される系の座標とともに，観測手段の座標にも依存する波動関数 $\Psi(t)$ によって表わされる．切りはなして考えられた系を波動関数 $\psi(t)$ だけによって記述することはまったくできなくなる．このように，測定手段の介入によって，測定前の系の状態と測定後の系の状態とのあいだの因果関係はすべて壊される．このことから，測定後に系がどんな状態になるかを確実に予想することは，一般には不可能であることがわかる[10]．

現象を記述する際に介入してくる諸概念が，それを観測する方法とどんなに分ちがたいものであるか，またこの事実によって因果律にどんな制限が課せられるかを十分に示すために，光子を放出して励起を失う原子の例をとろう．同時にこの例によって，波の形と粒子の形とのあいだの相補性についても，もう一つの説明が与えられよう．

原子が時刻 $t=0$ に励起状態にあると仮定する．その平均寿命を τ とし，放出される光子のエネルギーを $\hbar\omega$ とする．光が放出される時刻を正確に定めてみよう．この時刻を決定するためには，適当な計数器で原子を完全にとりまいておく．これらの計数器の一つはやってきた光子によって作動するであろう．計数器が働いた時刻，原子とその計数器との

---

(10) 測定結果に関する統計的予想は，測定の手続きそのものの機構を検討することによってきわめて自然に導き出される．この検討においては，測定手段も量子的対象として扱われ，全体（系＋測定手段）がシュレーディンガー方程式にしたがって因果的に変化すると考える．測定機構に関するきわめて簡潔な説明は，F. London, E. Bauer, *La Théorie de l'Observation en Mécanique Quantique*, Hermann, Paris, 1939 にある．この問題のより詳しい説明は，J. von Neumann, *Mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik*（邦訳；フォン・ノイマン《量子力学の数学的基礎》井上・広重・恒藤訳，みすず書房）と D. Bohm, *Quantum Theory*, Prentice Hall Inc., New York, 1951（丸善版リプリントあり）（邦訳；ボーム《量子論》高林・河辺・後藤・井上訳，みすず書房）に見られる．

距離，および光の伝播速度 c を知れば，放出が起こった時刻は容易に計算される．それにもかかわらず，量子論はこの問題に対して統計的な予想をするだけである．τ よりずっと長い時間 t たってからの状態を調べるならば，系（原子＋光子）の状態は容易に記述される．原子はほとんど確実にその基底状態にあり，光子はきわめてよい近似で――これは証明なしに認めることにしよう―― 一つの波束 $\phi(r,t)$ によって表わされる．この ϕ は t および光子から原子までの距離 r の関数として，定数を除けばつぎのように与えられる：

$$f(r,t)=\begin{cases}0 & (r>ct \text{ のとき})\\ \dfrac{1}{r}\exp\left[-\left(i\omega+\dfrac{1}{2\tau}\right)\left(t-\dfrac{r}{c}\right)\right] & (r<ct \text{ のとき}).\end{cases} \tag{34}$$

原子から距離 R のところに光子を見いだす確率は，$t<R/c$ のあいだは0で，それ以後の各瞬間には，定数を除いて $\exp[-(t-R/c)/\tau]$ に等しい．これからよく知られた崩壊時間の統計的分布を与える指数法則が得られる．

この法則は実際に，きわめて多数の崩壊に対して実験的に観測される法則である．しかしながら，個々にとられた各原子の崩壊時間を量子論は予言することができない．それゆえ，量子論は励起された原子の統計的集団が励起を失う過程を正確に記述するが，原子が励起を失う個々の現象を完全には記述しないと結論したくなる．

この抗議に対する答はつぎのとおりである．崩壊時間という概念は，それを明らかにするために用いる実験装置と分離できないものであり，この装置と独立に考えられた原子の変化を特徴づける一性質とみなしてはならない．実際，上に述べた装置と相補的な別の実験装置が存在し，これらによると正確な崩壊時刻の存在そのものとまったく相容れない崩壊現象の様相を明らかにすることができる．放射された光の干渉効果を観測する装置がすべてそれである．この装置においては波動（34）は二つの波束に分けられ，別々の光路を通ったのちにふたたび結びつけられる．干渉が観測されるためには，光路の差が波動(34)の空間的なひろがりよりも小さいことが必要である[11]．これらの現象では，波の空間的なひろがりが直接に明確化され，したがって崩壊時間の概念はまったく意味を失う．

因果律に関して言えば，系（原子＋光子）が観測手段と相互作用しないあいだは，実際この系に適用される．この期間を通じて，シュレーディンガー方程式にしたがう波動関数によってこの系の力学的状態を記述することは可能である．特に光子は拡散する波束(34)によって表わされ，その境界（$r=ct$）は速さ c で原子から遠ざかる．しかしこのような

(11) 可視光線を放出する励起状態の平均寿命は 10^{-8} 秒程度である．したがって，放射波連の長さ $c\tau$ は 3 m 程度である．実際にメートル程度の光路差に対応する干渉像が観測されている．このことは，波連の空間的なひろがりと，崩壊時間という概念のあいまいさについて，ここでひき出された結論によく適合する．

因果律にしたがう記述は，系（原子＋光子）が観測手段との相互作用に入ると，ただちに成り立たなくなる．集合（系＋観測手段）が一つの不可分な全体をつくるために，系だけを切りはなして語ることがもはやできなくなるのである．この系の性質と考えられるものも，実は全体の性質である．それゆえ測定前と測定後の系の状態のあいだには，厳密な因果関係が存在しない．

この事態は古典論の厳密な因果律ときわめて深刻に異なる．古典系の力学変数の値はすべて各瞬間において正確に定められ，その時間的変化も厳密に決定されている．量子系のそれは，相補変数の対のあいだにある不確定性関係によって要求される近似の限界のなかでだけ定まり，その時間的変化も部分的に決められるにすぎない．どれほど衝撃的に見えようと，このような因果律の制限が実験的事実と矛盾するようなおそれはまったくない．系の力学変数の全体の時間的変化は，不確定性関係の要求する近似の限界のなかでしか実験的に観測されないからである．

演 習 と 問 題

1.　電磁場内の1粒子のハミルトニアン（第2章（25））はエルミートであること，したがってシュレーディンガー方程式の任意の解Ψのノルムが時間の経過のなかで保存されることを示せ．流れの定義として，古典力学との対応によって示されるもの，すなわち

$$J=\mathrm{Re}\left[\Psi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}m}\nabla-\frac{e}{mc}A\right)\Psi\right]$$

（A は電磁場のベクトル・ポテンシャル）をとれば，この場合連続の方程式が（11）と同じ形に書かれることを示せ．

2.　質量 m をもつ1次元の1粒子がポテンシャル $V(x)$ のなかを動き，x が $+\infty$ と $-\infty$ に近づくとき，$V(x)$ はそれぞれ漸近的に V_+ と V_- に（$1/|x|$ より速く）近づくとする．波数 $k_\pm=\sqrt{2m(E-V_\pm)}/\hbar$ を導入し，解 $u_E(x)$ の漸近的挙動が x 軸の両端で

$$u_E\underset{x\to-\infty}{\sim}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_-x}+R\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_-x},\qquad u_E\underset{x\to+\infty}{\sim}S\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_+x}$$

となる場合を考える．この型の解を重ね合わせて，x の増す方向に動く1粒子を表わす（1に規格化された）波束をつくる．十分長い時間ののち，この波束は透過波束と反射波束に分かれ，粒子がこれらの波束のうちの一つに見いだされる確率はそれぞれ $(k_+/k_-)|S|^2$ と $|R|^2$ に等しいことを示せ．

3.　x 軸に沿って動くように束縛された1粒子に対応する波動を

$$\psi(x)=(2\pi\xi^2)^{-\frac{1}{4}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0x-\frac{x^2}{4\xi^2}\right)$$

とする．運動量空間の波動関数 $\varphi(p)$ を計算せよ．$\psi(x)$ と $\varphi(p)$ とが1に規格化されていることを確かめよ．（13）と（21）とをつぎつぎに適用して，x，x^2 の平均値を計算し，

結果を比較せよ．同様に，(14) と (20) とをつぎつぎに適用して，p, p^2, $\exp[\mathrm{i}pX/\hbar]$ (Xは与えられた実定数) の平均値を計算して，結果を比較せよ．

4. $\Delta x\cdot\Delta p=\hbar/2$ となるような波束（最小波束）は必ず

$$(2\pi\xi^2)^{-\frac{1}{4}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0x-\frac{(x-x_0)^2}{4\xi^2}\right]$$

という形をとり，$\langle x\rangle=x_0$, $\langle p\rangle=p_0$, $\Delta x=\xi$, $\Delta p=\hbar/2\xi$ であることを示せ．

5. 力学的状態 $\psi(x)$ にある系に関する x とそれに共役な運動量 p の平均値を $\langle x\rangle$ および $\langle p\rangle$ とする．このとき力学的状態，$\exp(-\mathrm{i}\langle p\rangle x/\hbar)\psi(x+\langle x\rangle)$ に関する x と p の平均値はいずれも0であることを示せ．

6. §13, b) の位置の測定において，測定装置（光束＋顕微鏡）の量子的性質が本質的な役割を演じ，もしも光が量子化されていなければ不確定性関係が破れることを示せ．この例において，電子に関する不確定性関係に入ってくる定数 h は必ず，光量子の定義に入ってくる h より大きくないことを示せ．

7. 磁場内での偏向による運動量の測定 (§14, a)) において，測定精度を変えずに測定時間 $\tau=\pi mc/e\mathcal{H}$ をある程度まで短くできるが，この測定時間を決定する際の精度 $\Delta\tau$ は変わらないことを示せ．この例について時間－エネルギー不確定性関係を論ぜよ．光子との衝突による運動量の測定 (§14, b)) についても，時間 $1/\Delta\nu'$ に関して同じ問題がある．

8. §14, b) の運動量の測定は，光子の代りにどんな粒子を使って行なうこともできる．電子をこの粒子と衝突させ，衝突の際この粒子に移される運動量を測ればよい．この場合の運動量－位置不確定性関係を非相対論的近似の立場で論ぜよ．電子の位置の測定によって導入される不確定さは，用いられた粒子に関する不確定性関係に現われる定数 $\hbar$ に関係することを示せ．

9. 口径 d の絞りに開放時間 τ のシャッターがついているとき，一つの量子的粒子にこの絞りを通過させる．粒子は必ずこの装置（絞り＋シャッター）と，$\hbar/d$ 程度の運動量および $\hbar/\tau$ 程度のエネルギーをやりとりすることを示せ．

10. 顕微鏡による電子の位置の測定 (§13, b)) において，電子に伝えられる運動量を決定するために，操作の過程で顕微鏡に移される運動量の精密な測定を行なう．こうして運動量の測定の精度をよくすると，その代りに位置の測定の精度が落ち，不確定性関係を満たすことを示せ．

11. 等エネルギー荷電粒子のビームについてヤングの孔の実験を行ない，探知器としてウィルソンの霧箱を使って干渉縞を明らかにしようとする．これは，箱をヤングのスクリーンから十分はなしておいたときだけ可能である．このとき，各粒子がウィルソンの霧箱のなかでたどる《軌道》の観測によって，粒子がどの孔を通過したかを知ることはできない．このことを示せ（注 (7) を参照）．

第5章　波動力学の形式論の展開とその解釈

§1. 序　　説

前章でわれわれは量子論の統計的解釈についての基本事項を述べ，ごく一般的な見地に立って，この解釈が内容的に一貫していること，実験的事実と矛盾しないこと，また自然現象を記述するときにこの解釈が意味する特殊な条件を検討してきた．今後は（非相対論的近似による）粒子系の波動力学といういっそう狭い枠のなかで，すでに得られた一般的原理にしたがい，この解釈を補充し精密にしよう．

そこでわれわれは，問題の系の力学的状態が波動関数によって完全に定められることを承認する．古典理論における事態とは逆に，系の力学変数の値を各瞬間において正確に定めることは一般にできない．しかし，指定された力学変数の測定を行なえば，測定の結果はある確率法則にしたがい，この法則は波動関数を与えることによって完全に決定されるはずである．

第4章（第I節）においてわれわれは位置と運動量の測定に関する確率法則を述べ，また位置座標の関数または運動量座標の関数の平均値を表わす一般式を与えた．しかし最も一般的な場合，すなわち指定された力学変数が運動量および位置の座標の関数であるときに，この変数に関する測定の統計的分布を波動関数から導き出すことを許す規則はまだ与えていない．この空隙は本章の初めの三節で埋める．基本公理は第I節で与えられる．各力学変数 $\mathcal{A}$ には，波動関数の空間におけるある一つのエルミート演算子 A が結びつけられ，$\mathcal{A}$ の測定結果の平均値は A からつくられる式であって，第4章（§5）の式の一般化である．このことをどの力学変数に対しても，またこれらの関数のいずれに対しても要請すると，求める統計的分布は正確に決定される．これを具体的に定めることは A の固有値問題を解くことと密接に結びついている．第II節で，A の固有値と固有関数の性質を学ぶが，それはスペクトルがとびとびで固有関数が二乗積分可能という特別な場合に限っておき，つぎに A の固有関数列で波動関数を展開することにより確率法則を求める．第III節では，同じ問題を一般の場合，すなわち固有値のスペクトルがときにより連続な部分を含む場合について取り扱う．

第IV節では，共立な変数の完全集合を正確に同時に測ることから出発して量子系の波動関数を決定する問題を形式的に扱う．この《最大観測》が実行されないときは，系の力学

的状態に関する情報は不完全であるが，それにもかかわらず，系の研究は統計の方法によって進めることができる．ここで統計という言葉はふつうの意味に用いている．

二つの共立な変数には，交換する演算子が対応する．任意に二つずつとった演算子の交換子がいずれも0になるとすれば，すべての力学変数は，正確に同時に定められるであろう．これは古典理論に特有の状況であるが，実際はこれとは反対であって，ある変数の対は共立ではなく，対応する交換子は0と異なる．それゆえ，量子論においては交換子は重要な役割を演じる．第V節では交換子を学び，最もよく使われる交換子の演算を行ない，交換子の概念が特に便利であることを示すいくつかの方程式をたて，これを論じる．

I．エルミート演算子と物理量

これから考えてゆくことをはっきり説明するために例を必要とするときはいつでも，それを1次元（第3章を参照）または3次元（1粒子系）の量子系から借りることにする．しかし，これらの考察が何次元の量子系に対してもきわめて一般的に適用されるという見方をけっして失ってはならない．

§2. 波動関数の空間

与えられた量子系を表わすことができる波動関数は一つの関数空間に現われるから，これを正確に定義しておくのがよい．第4章§2で定義された分布 $P(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{p})$ とが意味をもつためには，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に規格化条件（第4章（3））を適用できることが必要十分である．そこで波動関数の空間をつぎのように定義する．

波動力学における波動関数とは，配置空間で定義された二乗積分可能な関数，すなわち積分 $\int|\psi(q_1,\cdots,q_R)|^2\mathrm{d}\tau$ が収束するような関数 $\psi(q_1,\cdots,q_R)$ である(1)〔$\mathrm{d}\tau$ は体積要素 $\mathrm{d}q_1\mathrm{d}q_2\cdots\mathrm{d}q_R$ を表わす〕．

波動関数を1に規格化する（第4章（3））ことによって，関数空間をもうすこし制限することもできよう．しかし，この制限をつけない方がよいということが明らかにされる．そのためには，あとでわかるように，統計的分布と確率の定義をすこし修正すればよい．

数学の用語によれば，いま定義した関数空間はヒルベルト空間である．実際にこれはヒ

(1)　このような関数のフーリエ変換 $\varphi(p_1,\cdots,p_R)$ はつねに存在する．それは二乗積分可能で，$\psi(q_1,\cdots,q_R)$ と同じノルムをもつ．さらに（付録Aを参照）測度0の集合を除いたところで一致する二つの関数を同じものとみなすことにすれば，φ と ψ との対応は一対一である．この規約はつねに認めることにする．

ルベルト空間を特徴づける諸性質をもつ．それらを列挙しよう．

第一に，これは線形空間である．ψ_1 と ψ_2 とが二乗積分可能な二つの関数ならば，それらの和も，そのおのおのと複素数との積も，またもっと一般に，λ_1 と λ_2 を任意の複素定数とするとき，線形結合

$$\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2$$

もすべて同様に二乗積分可能な関数である．

第二に，この空間においては内積が定義される．関数 ψ と関数 φ の内積は

$$\langle\varphi,\psi\rangle\equiv\int\varphi^*(q_1,\cdots,q_R)\,\psi(q_1,\cdots,q_R)\,\mathrm{d}\tau \tag{1}$$

と定義する．これが0ならば，関数 φ と ψ は直交するという．関数 ψ のノルム N_ψ とは，この関数とそれ自身との内積である：

$$N_\psi=\langle\psi,\psi\rangle.$$

内積の基本性質はつぎのとおりである：

a）φ と ψ の内積は，ψ と φ の内積の共役複素数である．すなわち

$$\langle\psi,\varphi\rangle=\langle\varphi,\psi\rangle^*. \tag{2}$$

b）ψ と φ の内積は ψ に関して線形である．言いかえれば，

$$\langle\varphi,\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2\rangle=\lambda_1\langle\varphi,\psi_1\rangle+\lambda_2\langle\varphi,\psi_2\rangle. \tag{3}$$

c）関数 ψ のノルムは負でない実数

$$\langle\psi,\psi\rangle\geqslant 0 \tag{4}$$

であり，$\langle\psi,\psi\rangle=0$ ならば必ず $\psi=0$ である[2]．

内積の定義自体を考えてみれば，これらの性質はすべて明らかである．性質 a）と b）を用いれば，内積 $\langle\varphi,\psi\rangle$ は φ に線形ではなく，反線形に依存していることが容易にわかる．すなわち

$$\langle\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2,\psi\rangle=\lambda_1^*\langle\varphi_1,\psi\rangle+\lambda_2^*\langle\varphi_2,\psi\rangle. \tag{3'}$$

性質 a)，b)，c）から内積のきわめて重要な性質，シュワルツの不等式が導かれる（問題1を参照）：

$$|\langle\varphi,\psi\rangle|\leqslant\sqrt{\langle\varphi,\varphi\rangle\langle\psi,\psi\rangle}. \tag{5}$$

等号が成り立つのは，関数 φ と ψ のうちの一方が他方の定数倍になるときであり，またそのときに限る．シュワルツの不等式によって，二つの関数 φ と ψ が二乗積分可能であるとき，内積を定義する積分（1）は確かに収束することが保証される．

---

(2) 厳密に言えば，ψ は測度0の集合の上で0でない値をとりうる．注(1)の規約にしたがって，このような関数を0と区別しない．

線形であることと内積が定義されることの他に，二乗積分可能な関数の空間は完備であるという性質をもつ．このことによって，この空間はヒルベルト空間と同等になる．完備であるというのは，二乗積分可能な関数列が〔ノルムに関して〕コーシーの収束条件を満たすとき，必ず二乗積分可能な関数に（二乗平均）収束するということを意味する．逆に，二乗積分可能な任意の関数は，〔適当な可算個の二乗積分可能な関数を基底にとるとき，その1次結合から成り，〕コーシーの収束条件を満たす関数列の（二乗平均）極限である（可分性）(3)．

§3. 平均値の定義

第4章 §5でわれわれは，$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ または $G(\boldsymbol{p})$ という形をとる力学変数を，それぞれ式 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ または $G(-i\hbar\nabla)$ に等しいある線形演算子 A と同一視するところまで話を運んだ．さらに――$P(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{p})$ に対して採用した定義の結果として――これらの力学変数の平均値は第4章（22）によって与えられたが，これはいまの記号によると，$\langle\Psi, A\Psi\rangle$ とも書かれる．波動関数が1に規格化されていないときには，$P(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{p})$ の式（第4章（2），（6））を波動関数のノルム $\langle\Psi,\Psi\rangle$ で割る必要が生じるので，前に考えた平均値は式 $\langle\Psi, A\Psi\rangle/\langle\Psi,\Psi\rangle$ によって置き換えなければならない．

これは任意の力学変数に一般化される．そこでわれわれはつぎのことを要請する．

a）任意の力学変数 $\mathcal{A}=A(q_1,\cdots,q_R;p_1,\cdots,p_R)$ にはつぎの線形演算子が対応する：

$$A\left(q_1,\cdots,q_R;\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1},\cdots,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_R}\right).$$

b）系が関数 $\Psi(q_1,\cdots,q_R)$ によって定められる力学的状態にあるとき，上記の変数がとる平均値はつぎの式で与えられる：

$$\langle A\rangle=\frac{\langle\Psi, A\Psi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle}. \tag{6}$$

古典ハミルトン関数とシュレーディンガーのハミルトニアンのあいだの対応（第2章，§15）は，力学変数と線形演算子のあいだの対応 a）の特殊な場合である．この対応に関して第2章 §15で与えられた制限条件はそのまま一般の場合に適用される．q がデカルト座標であることはもちろんである．さらに，演算子 A の定義のなかにあいまいなとこ

(3)　ヒルベルト空間について厳密詳細に学ぶためには M. H. Stone, *Linear Transformations in Hilbert Space*, Amer. Math. Soc., New-York, 1932 を見よ．主要な性質は A. Lichnerowicz, *Algèbre et Analyse Linéaire*, Masson Ed. Paris, 1947, また J. von Neumann の前掲書（131頁）にも示されている．二乗平均収束の定義については，付録Aの注(4)を参照．

ろがある，というのは，対応の操作をするとき普通の代数の量を，交換しない演算子で置き換えるからである．実際には，59頁の経験的規則にしたがってこのあいまいさを取り除く．

また，力学変数 $\mathcal{A}$ が物理量を表わすならば，それは q と p の実関数であり，$\mathcal{A}$ の測定の結果も，したがってもちろん平均値 $\langle A\rangle$ も実の量である．それゆえ $\langle\Psi, A\Psi\rangle$ は実数，すなわち

$$\langle\Psi, A\Psi\rangle=\langle A\Psi, \Psi\rangle \tag{7}$$

であり，これは測定が行なわれる系の力学的状態に関係せず，したがって関数 Ψ に関係しない．言いかえれば（101頁を参照），演算子 A はエルミートでなければならない．容易にわかるように——またあとで取り扱うすべての実例について確かめられるように——演算子 q_i と $(\hbar/\mathrm{i})\,\partial/\partial q_i$ がエルミートである限り，いつでも対応規則 a）によって実の力学変数にはエルミート演算子を対応させることができる．59頁に示された《対称化》の規則は，まさにこのために与えられたものである．

エルミート演算子の性質は §5 以下で系統的に学習する．ここではこの演算子の重要な性質を一つ述べておく．A がエルミートならば，A が適用される関数空間の二つの関数 Φ, Ψ の線形結合 $\Phi+\lambda\Psi$ について $\mathcal{A}$ の平均値を計算すると，実数になるはずである．したがって

$$\langle\Phi+\lambda\Psi, A(\Phi+\lambda\Psi)\rangle=\langle\Phi, A\Phi\rangle+\lambda\langle\Phi, A\Psi\rangle+\lambda^*\langle\Psi, A\Phi\rangle+|\lambda|^2\langle\Psi, A\Psi\rangle$$

という量は実数である．これは λ がどんな複素数の値をとっても成り立つはずである．$\langle\Phi, A\Phi\rangle$ と $\langle\Psi, A\Psi\rangle$ は実数であるから，λ の位相を α で表わすとき，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\langle\Phi, A\Psi\rangle+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\langle\Psi, A\Phi\rangle$$

が実数であり，これを言いかえると

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(\langle\Phi, A\Psi\rangle-\langle A\Phi, \Psi\rangle)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}(\langle A\Psi, \Phi\rangle-\langle\Psi, A\Phi\rangle)$$

となるが，この等式は任意の α に対して成り立つから，両辺の括弧のなかは 0 でなければならない．つまり，エルミート演算子 A の作用する関数空間の任意の二関数を Ψ と Φ とするとき，

$$\langle\Phi, A\Psi\rangle=\langle A\Phi, \Psi\rangle, \tag{8}$$

あるいは同じことであるが

$$\langle\Phi, A\Psi\rangle=\langle\Psi, A\Phi\rangle^*. \tag{8'}$$

（8′）はしばしばエルミート性を定義する関係式と考えられる．

二つの要請 a），b）によって物理量 $\mathcal{A}$ の値の統計的分布を定めることができる．こ

の節の終りとつぎの第II，III節はこの問題に当てられる．

§4. ゆらぎのないことと固有値問題

われわれが求める統計的分布のゆらぎは，標準偏差 ΔA によって測られる．

$$(\Delta A)^2 = \langle (A-\langle A\rangle)^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \qquad (\geqq 0).$$

A^2 は，A と同じように一つの力学変数であり，その平均値は要請 b）によって与えられる．偏差 ΔA が0のときにはゆらぎがなく，$\mathcal{A}$ がはっきり決まった値をとると確言できる．その値は明らかに $\langle A\rangle$ に等しい．

関係式 $\Delta A=0$ が関数 Ψ にどんな条件を課するかを調べよう．演算子 A と A^2 の平均値に定義（6）を適用すると，この関係式はつぎの形に書かれる：

$$\langle \Psi, A^2\Psi\rangle\langle \Psi, \Psi\rangle = \langle \Psi, A\Psi\rangle^2.$$

しかし量 $\langle \Psi, A^2\Psi\rangle \equiv \langle \Psi, A(A\Psi)\rangle$ は $\langle A\Psi, A\Psi\rangle$ に等しい．このことを見るには，エルミート演算子 A の性質（8）を関数 Ψ と $A\Psi$ に適用すればよい．これから

$$\langle \Psi, A\Psi\rangle^2 = \langle \Psi, \Psi\rangle\langle A\Psi, A\Psi\rangle$$

を得る．これはシュワルツの不等式が等式になった場合であり，したがって関数 Ψ と $A\Psi$ は比例する．$\mathcal{A}$ の統計的分布のゆらぎは，a を一つの定数とするとき，

$$A\Psi_a = a\Psi_a \qquad (9)$$

となるような力学的状態 Ψ_a に対して0になる．

（9）は固有値方程式である．時間を含まないシュレーディンガー方程式によって，この型の方程式の例はすでに与えられている．こうしてわれわれは第一の結論に到達した．

物理量 $\mathcal{A}$ が確実に（すなわち1に等しい確率で）はっきり決まった値をとるのは，物理系の力学的状態が $\mathcal{A}$ に対応するエルミート演算子の固有関数 Ψ_a によって表わされるときであり，またそのときに限る．そしてこの量がとる値はこの関数に対応する固有値である．

いま述べたばかりのことは，特別な場合として系のエネルギー $H(q_i;p_i)$ についても成り立つ．これに対応する演算子すなわちシュレーディンガーのハミルトニアンは，時間を含まないシュレーディンガー方程式をつくったとき，事実上系のエネルギーと同一視された（第2章，§3）．あの場合われわれは，系が定常状態にあり，その波動関数が固有値 E に対応する演算子 H の固有関数であるとき，系のエネルギーははっきり決まった値 E をとるということを承認した．これは，§3で導入した一般的な要請 a)，b）にうまく適合する．

（9）を導くまでのすべての議論は，いろいろな内積に入ってくる関数 Ψ，$A\Psi, A^2\Psi$

がヒルベルト空間に属することを仮定している．（9）そのものも，それに含まれる未知関数 Ψ_a が，特に断らない限り，二乗積分可能でなければならないとしておく．

こうすると，固有値問題が解をもたないことがしばしば起こりうる．q_i や $(\hbar/\mathrm{i})\partial/\partial q_i$ のようにありふれた演算子の場合がそうである．1次元の系の場合について，これら二つの演算子に対する固有値問題を実際に吟味しよう．q については

$$(q-q')\,\phi(q) = 0$$

と書かれるが，これが成り立つのは，$q = q'$ 以外でいたるところ $\phi(q)$ が0になる場合だけである．単にこのような条件を満たす二乗積分可能な関数がないというばかりでなく，ただ一つの可能な解は，一点を除きいたるところで0というはなはだ奇妙な関数である．これについては§8で論ずる．$(\hbar/\mathrm{i})\,\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ については，固有値問題が

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\phi(q) = p'\phi(q)$$

と書かれる．p' がどんな値であっても，これは定数を除いて決まった一つの解をもつ．関数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q/\hbar}$ がそれである．この固有関数は二乗積分可能ではない．

いま検討した二つの演算子に対して，上に述べた結果は興味をひかない．一般的な興味のある命題に到達しようと望むならば，固有値問題（9）の二乗積分可能でない解をも同様に考える必要がある．われわれはすでに特殊な固有値方程式として，1次元の系のシュレーディンガー方程式（第3章を参照）を取り扱ったが，この検討の結果により一般的な命題に到達することができる．シュレーディンガーのハミルトニアンの固有値のスペクトルは一般に二つの部分から成り，一つはとびとびの固有値の列で，その固有関数は有限なノルムをもち，他の一つは固有値の連続スペクトルで，その固有関数は全空間において有界であるがノルムは無限大である．近いエネルギーの値に対応する連続スペクトルの固有関数を重ね合わせることによって，二乗積分可能な関数をつくることができ，そのエネルギーは，直観的にはよくわかるように，正確な形では決められないにしても，ともかく標準偏差をいくらでも小さくするようには決められる．

第3章§13の記号を使って，この点を詳しく述べよう．H の連続スペクトルの固有値 ε に対応する固有関数 $y(x\,;\varepsilon)$

$$Hy(x\,;\varepsilon) = \varepsilon\, y(x\,;\varepsilon) \tag{10}$$

から出発して，《固有微分》[4]：

$$Y_\varepsilon(x\,;\delta\varepsilon) = (\delta\varepsilon)^{-\frac{1}{2}}\int_\varepsilon^{\varepsilon+\delta\varepsilon} y(x\,;\varepsilon')\,\mathrm{d}\varepsilon' \tag{11}$$

---

[4] 《固有微分》の定義において，乗数 $(\delta\varepsilon)^{-1/2}$ をつけたのは，$\delta\varepsilon\to 0$ となる極限において，ノルムを有限に保つためである．

をつくる．これは二乗積分可能な関数であって，このような波動関数によって計算すれば量$\langle H\rangle$と ΔH は確定した意味をもつ．(10) と (11) を使って，容易に

$$\langle H\rangle=\frac{\langle Y_\varepsilon, HY_\varepsilon\rangle}{\langle Y_\varepsilon, Y_\varepsilon\rangle}\underset{\delta\varepsilon\to 0}{\sim}\varepsilon+O(\delta\varepsilon),$$

$$\langle H^2\rangle=\frac{\langle Y_\varepsilon, H^2Y_\varepsilon\rangle}{\langle Y_\varepsilon, Y_\varepsilon\rangle}\underset{\delta\varepsilon\to 0}{\sim}\varepsilon^2+\varepsilon\cdot O(\delta\varepsilon)$$

であることがわかる．したがって標準偏差 $\Delta H\equiv\sqrt{\langle H^2\rangle-\langle H\rangle^2}$ は，$\delta\varepsilon$ が0に近づくとき $(\varepsilon\delta\varepsilon)^{1/2}$ のように0に近づく．これは任意に小さくすることができる．この結果はつぎのように言い表わされる．

A の連続スペクトル（これが存在するとき）の限られた領域 $(\alpha, \alpha+\delta\alpha)$ にある固有値に対応する（ノルム無限大の）固有関数を重ね合わせて二乗積分可能な関数をつくり，領域の幅 $\delta\alpha$ を十分小さく選ぶことによって，A の値の平均値（$\simeq\alpha+O(\delta\alpha)$）からの標準偏差をいくらでも小さくすることができる．

結論として，(9) によって定義された固有値問題は，とびとびのスペクトルの領域においてはもちろん，連続スペクトルの領域，すなわち固有関数がもはやヒルベルト空間に属さない領域においても基本的な役割を演じることが明白となった．それゆえ，この固有値問題を系統的に調べよう．

II．とびとびのスペクトルの研究

§5．エルミート演算子の固有値と固有関数

そこで固有値方程式

$$A\psi_a=a\psi_a \tag{9}$$

を考えよう．

本節を通じて，ヒルベルト空間にある固有解 ψ_a だけを考える．これによってスペクトルはとびとびのものに制限される．連続スペクトル（これが存在するとき）をも含む一般的な研究は第III節で行なうことにしよう．

A は線形演算子であるから

1) ψ_a が固有関数ならば，c を任意の定数とするとき，$c\psi_a$ も同様に同じ固有値に対する固有関数である．この定数を固定するために普通用いられるのは，固有関数を1に規格化することである：

$$\langle\psi_a, \psi_a\rangle=1.$$

こうしておけば，ψ_a は任意の位相の定数を除いて定められる．

2) 二つの線形独立な関数 $\psi_a^{(1)}$，$\psi_a^{(2)}$ (5) が同じ固有値に対応するとき，これらの関数の任意の線形結合についても同じことが成り立つ．この場合は，**縮退**があるという．与えられた固有値に対する線形独立な固有関数の個数の最大値は縮退の**位数**と呼ばれる（第3章で連続スペクトルを調べたとき，2位の縮退の例に出会った)．

エルミート性の定義とそれから出てきた性質（8）の結果として，二つの基本性質が得られる．

1° 固有値aはすべて実数である．実際，等式（9）の両辺に左から ψ_a を掛けて内積をとれば，a は力学的状態 ψ_a に関する A の平均値に等しいことがわかる．

$$a = \frac{\langle\psi_a, A\psi_a\rangle}{\langle\psi_a, \psi_a\rangle}.$$

これはエルミート性の定義により実数である．

2° 異なる固有値に対応する二つの固有関数は直交する（第3章，§13)．——実際，

$$A\psi_1 = a_1\psi_1, \qquad A\psi_2 = a_2\psi_2$$

としよう．第1式に左から ψ_2 を掛けて内積をとり，第2式に右から ψ_1 を掛けて内積をとって引き算をすれば，性質（8）を考慮して

$$0 = \langle\psi_2, A\psi_1\rangle - \langle A\psi_2, \psi_1\rangle = (a_1-a_2)\langle\psi_2, \psi_1\rangle$$

を得る．よって $a_1 \neq a_2$ ならば必ず

$$\langle\psi_2, \psi_1\rangle = 0.$$

上の結果として，異なる固有値に属する二つの固有関数は線形独立である．実際，

$$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0$$

となるような数 λ_1，λ_2 が見いだされたとしよう．各項に左から ψ_1 を掛けて内積をとれば，直交性を考慮して，

$$\lambda_1\langle\psi_1, \psi_1\rangle = 0$$

となるから，λ_1 は必ず0である．同様にして $\lambda_2 = 0$ が示される．

a が位数 n の縮退した固有値であるとき，これらの固有関数はいずれも，線形独立な n 個の特別な固有関数 $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \cdots, \psi^{(n)}$ の線形結合の形でつねに表わされる．これら n 個の基底関数の選び方には，大きな任意性がある．しかしいつでも，これらが1に規格化され，互いに直交するようにとることができる．この性質をもっていない列 $\psi^{(1)}, \cdots, \psi^{(n)}$ か

---

(5) 二つの関数 ψ_1，ψ_2 は $\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2 = 0$ となるような定数 λ_1，λ_2 が $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ 以外に見いだされないとき，線形独立である．

ら出発して，たとえばつぎのような操作（シュミットの直交化法）を行なうことができる．$\varphi^{(1)}$ を

$$c_1\varphi^{(1)} = \psi^{(1)}$$

とし，$\langle\varphi^{(1)},\varphi^{(1)}\rangle=1$ となるように定数 c_1 を調整する．すなわち

$$|c_1|^2 = \langle\psi^{(1)},\psi^{(1)}\rangle.$$

$\varphi^{(2)}$ は

$$c_2\varphi^{(2)} = \psi^{(2)}-\varphi^{(1)}\langle\varphi^{(1)},\psi^{(2)}\rangle$$

によって定める．$\psi^{(1)}$ と $\psi^{(2)}$ とは線形独立であるから，左辺は確かに0でない．明らかに $\langle\varphi^{(2)},\varphi^{(1)}\rangle=0$. c_2 は $\langle\varphi^{(2)},\varphi^{(2)}\rangle=1$ となるように調整する．$\varphi^{(3)}$ は

$$c_3\varphi^{(3)} = \psi^{(3)}-\varphi^{(1)}\langle\varphi^{(1)},\psi^{(3)}\rangle-\varphi^{(2)}\langle\varphi^{(2)},\psi^{(3)}\rangle$$

によって定める．この関数は確かに0でない．これは明らかに $\varphi^{(1)}$ および $\varphi^{(2)}$ に直交し，c_3 を適当に選べば規格化される．以下同様である．こうしてつくられた n 個の関数 $\varphi^{(1)},\cdots,\varphi^{(n)}$ は $n(n+1)/2$ 個の関係式

$$\langle\varphi^{(l)},\varphi^{(m)}\rangle = \delta_{lm} \qquad (l,m=1,2,\cdots,n)$$

を満たす．ここで δ_{lm} はクロネッカーの記号である：

$$\delta_{lm} = \begin{cases} 1 & (l=m \text{ のとき}), \\ 0 & (l\neq m \text{ のとき}). \end{cases}$$

これらは直交規格化関数列をつくると言う(*).

縮退した固有値の研究に対しては，つぎの性質を補っておかなければならない．これは証明をつけずに述べておく(3)．縮退の位数が無限大のとき，すなわちいくらでも多くの個数の線形独立な固有関数が見いだされるとき，われわれはいつでも固有関数の（可算な）直交規格化列 $\varphi^{(1)},\varphi^{(2)},\cdots,\varphi^{(r)},\cdots$ をつくることができ，しかも固有値 a に対応する任意の固有関数はこれらの関数の級数に展開される．

同様に，固有値は（有限または可算の）とびとびの列 $a_1,a_2,\cdots,a_p,\cdots$ をつくるということも示される(3)．これはヒルベルト空間内にある固有関数に対応する固有値に特有の性質である．

§6. 直交規格化固有関数による波動関数の級数展開

いまわかったように，A の各固有値 a_p に直交規格化固有関数列

$$\varphi_p^{(1)},\varphi_p^{(2)},\cdots,\varphi_p^{(r)},\cdots$$

(*) ［訳注］ 数学で言う正規直交系．

を対応させることができ，a_p が縮退していないか，有限位の縮退をしているか，または無限に縮退しているかによって，この列は一つの要素から成るか，有限個または無限個の要素から成る．これらすべての関数からつくられた集合を $\{\varphi_p^{(r)}\}$ によって表わす．この集合に属する関数はすべて関係式

$$A\varphi_p^{(r)} = a_p\varphi_p^{(r)}, \tag{12}$$

$$\langle\varphi_p^{(r)}, \varphi_q^{(s)}\rangle = \delta_{pq}\delta_{rs} \tag{13}$$

を満たす．

問題は，ヒルベルト空間に属する任意の波動関数 ψ が，系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ の関数項級数によってどの程度まで表わされるかを知ることにある．ψ が A の固有関数ならば確かにこれは可能であり，この場合，展開の 0 でない項は同じ固有値に対応する関数 φ に関する項だけである．任意の ψ に対してこれが可能であるとき，系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ は完全であると言う．

直交規格化関数による級数展開の性質をいくつか証明を省いて(3)示しておく．

$u_1, u_2, \cdots, u_n, \cdots$ は直交規格化関数列であるとする．

i）ψ がこれらの関数によって級数展開可能で

$$\psi = \sum_n c_n u_n$$

ならば，展開の係数は

$$c_n = \langle u_n, \psi\rangle$$

であり，パーセバルの関係式を満たす：

$$\sum_n |c_n|^2 = \langle\psi, \psi\rangle.$$

ii）逆に，数級数 $\sum_n |c_n|^2$ が収束して N に等しいとき，展開 $\sum_n c_n u_n$ はノルム N の関数 ψ に（二乗平均）収束する．

iii）展開 $\sum_n c_n u_n$ と $\sum_n d_n u_n$ がそれぞれ ψ と φ に収束するならば，級数 $\sum_n d_n^* c_n$ は収束して和は φ と ψ の内積に等しい．

$$\langle\varphi, \psi\rangle = \sum_n d_n^* c_n.$$

iv）任意の二乗積分可能な ψ に対して，級数

$$\hat{\psi} = \sum_n u_n\langle u_n, \psi\rangle$$

はいつでも収束する．差 $\psi-\hat{\psi}$ は関数 u_n のいずれに対しても直交し，そのノルムは $\langle\psi, \psi\rangle-\langle\hat{\psi}, \hat{\psi}\rangle$ に等しい．それゆえつねに

$$\langle\psi, \psi\rangle \geqslant \langle\hat{\psi}, \hat{\psi}\rangle$$

であり，等号が成り立つときは $\psi = \hat{\psi}$ である．

これらの性質は，関数 u がただ一つの目じるしでなく，とびとびの値をとる目じるしをいくつかもつ場合にも，すべてそのまま成り立つ．それゆえ系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ にも適用される．特に，系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ が完全であるならば，すべての波動関数 Ψ は級数

$$\Psi = \sum_{p,r} c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)} \tag{14}$$

によって表わされ，その係数は

$$c_p^{(r)} = \langle \varphi_p^{(r)}, \Psi \rangle \tag{15}$$

によって与えられ，パーセバルの関係

$$\sum_{p,r} | c_p^{(r)} |^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle \tag{16}$$

を満たす．

さらに，二つの波動関数 Ψ_1，Ψ_2 の内積は

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \sum_{p,r} \langle \Psi_1, \varphi_p^{(r)} \rangle \langle \varphi_p^{(r)}, \Psi_2 \rangle \tag{17}$$

である．

実際，数学的厳密性に留意しないことにすれば，(15) と (16) は容易に確かめられる．これらの等式の右辺にある Ψ に (14) を代入し，直交規格化関係 (13) を利用すればよい．(17) も同様な手続きによって得られる．

普通のベクトル空間との類似は印象的である．直交規格化関数の完全系は，長さが1で互いに直交する基底ベクトル系の役割を演じる．関数 Ψ はこの（無限次元の）空間のベクトルであり，係数 $\langle \varphi_p^{(r)}, \Psi \rangle$ は，この底ベクトル方向にとった Ψ の成分であり (式(15))，このベクトルのノルムすなわち長さの二乗は，その成分の絶対値の二乗の和に等しい（式(16))．Ψ_1 と Ψ_2 の内積は，Ψ_2 の各成分と，Ψ_1 の対応する成分の共役複素数との積をとり，それを加えたものに等しい．

§7. ノルムの有限な完全固有関数系をもつ演算子に対応する量の測定結果の統計的分布

任意の波動関数 Ψ を (14) の形の展開で表わすことができれば，A に関するどのような問題の検討もたいそうやさしくなる．そこで，演算子 A は直交規格化固有関数の完全系をもっていると仮定する（調和振動子のハミルトニアン（第12章）はこの例の一つである）．この系はもちろんただ一つではない．関数の位相はいつでも変えることができるし，また同じ固有値に関する直交規格化関数系は，これらの関数の直交規格化線形結合によって置き換えられる．しかし，これから述べる諸性質は系の選び方に無関係である．

$A\Psi$ のような関数が必ず二乗積分可能であるという先験的な保証はない．しかし (14) から

$$A\Psi = \sum_{p,r} c_p^{(r)} A\varphi_p^{(r)} = \sum_{p,r} a_p c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}.$$

これが収束するためには（§6，性質 i）と ii)) $\sum_{p,r} a_p^2 |c_p^{(r)}|^2$ の収束が必要十分であり，またこの場合，この数級数の和は $A\Psi$ のノルムに等しい．こうして，$A\Psi$ がヒルベルト空間に属するかどうかを判定する方法が得られた．

関数 $A^2\Psi$ に対しても同様な結論に達する．もっと一般に，関数 $F(x)$ から出発して，展開 (14) を使い，収束を条件として，演算子 A の関数である演算子 $F(A)$ を定義することができる．Ψ に対する作用は

$$F(A)\Psi = \sum_{p,r} F(a_p) c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}$$

によって与えられる．この級数が収束するとき，すなわち，数級数

$$\sum_{p,r} |F(a_p)|^2 |c_p^{(r)}|^2$$

が収束するような関数の全体に対して，この演算子は確かに定義されている．この場合，こうして定義された $F(A)\Psi$ は，定義に使った系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ が何であっても同じであるが，これを確かめる仕事は読者に任せよう．

特に，ξ をパラメータとする演算子 $e^{i\xi A}$ はヒルベルト空間の全関数に対して定義される．実際，

$$e^{i\xi A}\Psi = \sum_{p,r} e^{i\xi a_p} c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)} \tag{18}$$

であり，この級数の収束条件すなわち数級数 $\sum_{p,r} |c_p^{(r)}|^2$ の収束はつねに満たされている．

ここまでくると系のどんな力学的状態に対しても量 $\mathcal{A}$ の統計的分布を決定することができる．実際，この分布を完全に決めるためには分布の特性関数 $f(\xi)$ を知ればよいが，$f(\xi)$ はこの状態における量 $e^{i\xi A}$ の平均値であると定義する[6]． §3の要請 b）のごく

---

[6] すなわち，定数を除いて，この分布のフーリエ変換である．X は区間 $(-\infty, +\infty)$ に含まれるすべての値をとりうる確率変数であるとし，X が区間 $(x, x+dx)$ に見いだされる確率を $P(x)dx$ とする．この統計的分布の特性関数 $f(\xi)$ は $e^{i\xi X}$ の平均値，すなわち

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi x} P(x)\,dx$$

である．X があるとびとびの値 $x_1, \cdots, x_n, \cdots$ だけをとり，これらの値をとる確率がそれぞれ $w_1, \cdots, w_n, \cdots$ であるならば， ↗

自然な拡張として，この平均値は式

$$f(\xi)=\frac{\langle\Psi,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi A}\Psi\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle}$$

によって定義される（A の平均値が定義できない場合も含めて，この式はつねに意味をもつ）．

考えている力学的状態を表わす波動関数を Ψ とする．展開 (14) と (18) および内積に対する式 (17) を使うと，

$$f(\xi)=\sum_p w_p\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi a_p}$$

となり，w_p は

$$w_p=\frac{\sum_r|c_p^{(r)}|^2}{\langle\Psi,\Psi\rangle}=\frac{\sum_r|\langle\varphi_p^{(r)},\Psi\rangle|^2}{\langle\Psi,\Psi\rangle} \tag{19}$$

を表わす．特性関数の形そのものから，つぎのことがわかる．

1. 量 $\mathcal{A}$ がとりうる値は，それに対応する演算子の固有値 $a_1, a_2, \cdots, a_p, \cdots$ だけである；
2. $\mathcal{A}$ がこれらの値のうちの一つ a_p をとる確率は w_p に等しい．

容易にわかるように，$\sum_p w_p=1$（パーセバルの関係）であり，$\mathcal{A}$ の平均値は，収束を条件として，

$$\langle A\rangle=\sum_p w_p a_p$$

で与えられ，またもっと一般に，関数 $f(\mathcal{A})$ の平均値は，存在するとすれば

$$\langle f(A)\rangle=\sum_p w_p f(a_p)$$

で与えられる．

特に，$\mathcal{A}$ が与えられた値を確実にとるためには，Ψ がこの固有値に対応する固有関数であることが必要十分であり，このことは §4 の推論と一致する．

ここで得た結果は系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ の選び方によらない．この事実をもっと明確に示す形で，

↘

$$f(\xi)=\sum_n w_n\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi x_n}.$$

もっと一般に，$X\leqslant x$ となる確率が $F(x)$ であるとき，スティルチェス積分を使って

$$f(\xi)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi x}\,\mathrm{d}F(x)$$

である．

結果を言い表わすこともできる．

$$\Psi_p=\sum_r \varphi_p^{(r)}\langle\varphi_p^{(r)},\Psi\rangle$$

によって定められる関数 Ψ_p は実際この選び方によらない（問題4を参照）．これで展開(14) はまた

$$\Psi=\sum_p \Psi_p \tag{20}$$

と書かれる．言いかえれば，A の相異なる固有値のおのおのに対する固有関数の和の形で Ψ を表わすことができ，この表わし方は一意的である．こうすれば，値 a_p を見いだす確率 w_p は Ψ_p のノルムと Ψ のノルムとの比に等しい．すなわち

$$w_p=\frac{\langle\Psi_p,\Psi_p\rangle}{\langle\Psi,\Psi\rangle}. \tag{21}$$

III. 一般の場合における測定結果の統計

§8. 連続スペクトルのむずかしさ．ディラックの δ 関数の導入

系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ が完全でないときには，われわれが到達した結論はすべて崩れてしまう．これはけっして例外的な場合ではない．しかしながら，§4 の議論は上記の理論が拡張される可能性を暗示する．その場合もやはり固有値方程式（9）から出発し，固有解に対して，ヒルベルト空間に属するという制限よりももっと弱い制限をつける．そのためには，この理論を通じてきわめて重要な概念，直交性と規格化の概念を，ノルム無限大の固有解にまで拡張しなければならない．

この探求の方向を決めるために，1次元の系に関する二つの例，位置と運動量の統計的分布の決定を考える．これらの場合，統計的分布が知られている．§7の結果の形式的な拡張はそれによって容易になるであろう．位置座標 q は区間 $(-\infty,\ +\infty)$ にあるすべての値をとることができ，q を区間 $(q', q'+\mathrm{d}q')$ 内に見いだす確率は

$$P(q')\,\mathrm{d}q'=|\psi(q')|^2\,\mathrm{d}q' \tag{22}$$

に等しい．ただし，$\psi(q)$ は系の力学的状態を表わす波動関数で，1に規格化してあるものとする．同じように，演算子 $(\hbar/\mathrm{i})\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ によって表わされる運動量 p も区間 $(-\infty,\ +\infty)$ にあるすべての値をとることができ，p を区間 $(p', p'+\mathrm{d}p')$ 内に見いだす確率は

$$\Pi(p')\,\mathrm{d}p'=|\varphi(p')|^2\,\mathrm{d}p' \tag{23}$$

に等しい．ただし，$\varphi(p)$ は波動関数 $\psi(q)$ のフーリエ変換で，適当に規格化してあるものとする．

これら二つの場合に，問題の量がとりうる値のスペクトルは連続スペクトルである．こ

れが前の場合と本質的に異なる点であり，前の場合の特徴は，スペクトルがとびとびであること，また，このスペクトルの値に対応する項から成る級数によって，任意の波動関数 ψ が表わされる ((14) または (20) を参照) ということであった．連続スペクトルの場合へ自然に拡張する方法は，ψ を表わすために級数ではなく積分を使うことにある．整理した形で言えば，スペクトルがまったくとびとびの場合は，つぎのようであった．

エルミート演算子 A がとびとびの固有値の列をもち，簡単のため縮退がないと仮定する．その各 a_n に（位相を除いて定まった）固有関数 φ_n が対応し

$$A\varphi_n = a_n\varphi_n, \tag{24}$$

$$\langle\varphi_n, \varphi_{n'}\rangle = \delta_{nn'} \tag{25}$$

が成り立つ．

直交規格化系 $\{\varphi_n\}$ は完全であり，任意の関数——1 に規格化されているとする——は級数

$$\psi = \sum_n c_n\varphi_n \tag{26}$$

によって表わされ，直交規格化関係 (25) によって

$$\langle\varphi_n, \psi\rangle = \sum_{n'} c_{n'}\langle\varphi_n, \varphi_{n'}\rangle = c_n \tag{27}$$

が成り立つ．同じ関係を使えば，特性関数を表わす式として，

$$\langle\psi, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi A}\psi\rangle = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi a_{n'}}\langle\varphi_n, \varphi_{n'}\rangle = \sum_n |c_n|^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi a_n} \tag{28}$$

が得られる．これから，A が値 a_n をとる確率は展開 (26) における φ_n の係数の絶対値の二乗 $|c_n|^2$ に等しいことが導かれる．

類推の考えから，固有値 p' に対する演算子 $p=(\hbar/\mathrm{i})\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ の固有解を $u(p';q)$ で表わそう．

$$p\,u(p';q) \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}u(p';q) = p'u(p';q). \tag{24'}$$

形式的な展開を追って，波動関数 $\psi(q)$ を

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p')\,u(p';q)\,\mathrm{d}p'$$

という形の積分で表わす．

形式的な類推を最後まで追えるとすれば，$|c(p')|^2\mathrm{d}p'$ は p が区間 $(p', p'+\mathrm{d}p')$ 内に見いだされる確率である．それゆえ $|c(p')|^2 = |\varphi(p')|^2$ であること，言いかえれば $c(p')$ は位相の因数を除いて $\varphi(p')$ に等しいことが必要である．固有解 $u(p';q)$ そのものが定数を除いて定まるのであるから，(26) に似た式が

$$\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\,u(p';q)\,\mathrm{d}p' \tag{26'}$$

と書けるように上記の定数を選ぶことがいつでもできる．各固有値 p' に対する係数 $\varphi(p')$ は，(27) の一般化として，

$$\varphi(p')=\langle u(p';q),\psi(q)\rangle \tag{27'}$$

に等しいはずである．この式から，内積のなかの $\psi(q)$ にその積分表示 (26′) を代入すれば，

$$\varphi(p')=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\langle u_{p'},u_{p''}\rangle\mathrm{d}p'' \tag{29}$$

が得られる．この式のなかでは，固有値 p' に対する固有解を表わすために簡略記号 $u_{p'}$ を用いた．内積$\langle u_{p'},u_{p''}\rangle$のこの性質は，運動量空間の任意の波動関数 $\varphi(p')$ に対して成り立たなければならない（φ に課せられた条件は二乗積分可能ということだけである）．これが直交規格化関係 (25) の一般化に当たる．

実際には，p' と p'' のどんな関数もこのような性質をもたない．それにもかかわらず，数学的厳密さ (7) についての過大な配慮をしなければ，ディラックにしたがって《特異関数》$\delta(x)$ を利用することができる．$\delta(x)$ を規定する性質は，点 $x=x_0$ において連続な任意の関数 $f(x)$ に対して

$$\int_a^b f(x)\,\delta(x-x_0)\,\mathrm{d}x=\begin{cases} f(x_0) & (x_0\ \text{が区間}\ (a,b)\ \text{内にあるとき}) \\ 0 & (x_0\ \text{が区間}\ (a,b)\ \text{外にあるとき}). \end{cases} \tag{30}$$

(29) を満たすには

$$\langle u_{p'},u_{p''}\rangle=\delta(p'-p'') \tag{25'}$$

とすればよい．この関係は，連続スペクトルまで直交規格化関係 (25) を一般化したものである．$x=0$ を含むごく小さい区間を除けばいたるところで 0 になり，この小区間できわめて狭くきわめて高いピークを示し，その結果全区間における積分が 1 に等しくなるような関数の極限として，《ディラックの関数》$\delta(x)$ を想像することができる．ピークの幅が 0 に近づく極限において

$$\delta(x)=\begin{cases} 0 & (x\neq 0\ \text{のとき}) \\ +\infty & (x=0\ \text{のとき}) \end{cases} \quad \text{そして} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\,\mathrm{d}x=1 \tag{31}$$

---

(7) (29) を書いたとき，われわれはすでに数学的厳密さを破っている．正しい式は

$$\varphi(p')=\langle u_{p'},\int\varphi(p'')\,u_{p''}\,\mathrm{d}p''\rangle$$

だけであり，これから (29) を導くために，内積における q についての積分と p'' についての積分との順序を交換した．内積 $\langle u_{p'},u_{p''}\rangle$ が発散する以上，この手続きの正しくないことは確かである．

を得る．一点を除きいたるところで0となる関数の積分は，存在するとしても0以外ではありえないから，$\delta(x)$ は確かに普通の意味で関数というものではない．ここでは，深く立ち入って《ディラックの関数》の使用を数学的に理由づけることはしない．そのためには，普通の関数（もっと正確に言えば局所積分可能な関数）を特別な場合として含むような新しい概念，超関数の概念を導入することが必要である．数学者は，関数 $\delta(x-x_0)$ について語る代りに，関数 $f(x)$ に $f(x_0)$ を対応させる汎関数として定義された超関数 $\delta_{x_0}[f]$ について語るのである．言いかえれば，定義（30）は定義

$$\delta_{x_0}[f] = f(x_0)$$

に置き換えなければならない．読者が超関数の概念にほとんど慣れていないおそれがあるので，これについてはできるだけ簡単に触れるだけとし，ひきつづいて $\delta(x-x_0)$ という（不正確な）記号を使うことにする．さらにこの記号のもつ形式的な扱いやすさについては議論の余地がない．その主な計算規則は付録Aで列挙するが，そこではまた超関数の理論についてのごく簡単ないくらかの知識が見いだされよう．

p を測る問題にもどろう．(24′) の固有解 $u(p';q)$ は関数 $c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q/\hbar}$ である．一般化された直交規格化関係 (25′) が満たされるのは，$c=1/\sqrt{2\pi\hbar}$ としたとき，すなわち

$$u(p';q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q/\hbar}$$

のときである．こうすれば，付録Aの式 (22) を使って

$$\langle u_{p'}, u_{p''}\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p''-p')q/\hbar}\,\mathrm{d}q = \delta(p'-p'')$$

となる．さらに，二乗積分可能な関数 $\psi(q)$ はすべて，

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{d}p'$$

という形に書かれる（フーリエ積分の性質）から，固有関数 $u_{p'}$ は完全集合をつくる．そして，この《固有関数による級数展開》の係数 $\varphi(p')$ は確かに内積 $\langle u_{p'},\psi\rangle$ に等しい．実際，

$$\langle u_{p'},\psi\rangle = \langle u_{p'}, \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\,u_{p''}\,\mathrm{d}p''\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\langle u_{p'},u_{p''}\rangle\,\mathrm{d}p''$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\,\delta(p'-p'')\,\mathrm{d}p'' = \varphi(p').$$

一般化された直交規格化関係を利用して，フーリエ積分の可逆性がふたたび得られたことになる．

とびとびのスペクトルの場合との類似を追って，演算子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi p}$ を導入しよう．

$$e^{i\xi p}u(p';q)=e^{i\xi p'}u(p';q)$$

であるから

$$e^{i\xi p}\phi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\,e^{i\xi p'}u(p';q)\,dp'.$$

これから特性関数が得られ

$$f(\xi)=\langle\phi,e^{i\xi p}\phi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(p'')\,dp''\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi p'}\varphi(p')\,dp'\times\langle u_{p''},u_{p'}\rangle$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(p'')\,dp''\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi p'}\varphi(p')\,dp'\times\delta(p'-p'')=\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(p')|^2e^{i\xi p'}\,dp'.$$

これに対応する統計的分布はちょうど期待していた分布 (23) である (注[6]を参照).

位置の測定の検討も同じ形式にしたがって行なわれる. 演算子 q の固有値方程式の固有値 q' に対応する固有解は, 適当に規格化すれば, $\delta(q'-q)$ である. 実際, 付録Aの式 (19) により

$$q\delta(q'-q)=q'\delta(q'-q).$$

q' が $-\infty$ から $+\infty$ までのすべての値をとるときに得られる関数 $\delta(q'-q)$ の全体は直交規格化系をつくる. なぜなら (付録A (21))

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(q-q')\,\delta(q-q'')\,dq=\delta(q'-q'')$$

となるからである. また, 任意の波動関数 $\phi(q)$ が積分表示

$$\phi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(q')\,\delta(q'-q)\,dq \tag{32}$$

をもつから, この系は完全である. 〔展開〕係数 $\phi(q')$ が内積 $\langle\delta(q'-q),\phi(q)\rangle$ にちょうど等しいことも容易に確かめられる. p の測定のときと同じ筋の議論で, 係数の絶対値の二乗 $|\phi(q')|^2$ は, $q=q'$ であるための確率密度にちょうど等しいという結論が得られ, これは (22) と一致する.

§9. 一般の場合の固有関数による級数展開

固有値問題

$$A\phi=a\phi \tag{9}$$

にもどる. われわれはもはや固有解が有限なノルムをもつことを要求せず, 単に, それと任意の波動関数 (すなわちノルムの有限な任意の関数) との内積が収束することだけを要求する.

最も一般な場合, 固有値の全体はつぎのものを含む.

1°　有限個または可算無限個のとびとびの値 a_n から成るスペクトルで，整数の指数 n によって目じるしがつけられるもの．

2°　連続的な値 $a(\nu)$ のスペクトルで，ある領域を連続的に動く指数 ν によって目じるしがつけられるもの．

とびとびのスペクトルの固有関数は有限のノルムをもつ．とびとびのスペクトルの性質はすべて §5 で調べたから，これについては繰り返さない．

連続スペクトルの固有値 $a(\nu)$ に対する固有関数を $\phi(\nu; q_1, \cdots, q_R)$ とする．これはパラメータ ν の連続関数であり，そのノルムは確かに有限でない（すなわち関数空間内の《長さ無限のベクトル》である）．しかしながら，固有微分

$$(\Delta\nu)^{-\frac{1}{2}}\int_{\nu}^{\nu+\Delta\nu}\phi(\nu'; q_1, \cdots, q_R)\,\mathrm{d}\nu'$$

は――これを承認するのであるが――ノルムの有限な関数であり，$\Delta\nu$ が0に近づくとき一つの定数に近づくとする．すでに知ったように，1次元の系のハミルトニアンの連続スペクトルの固有関数はこの性質をもつ（第3章を参照）．§8 の演算子 q および $(\hbar/\mathrm{i})\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ がやはりこの性質をもつことも容易に確かめられる．

ある関数のノルムが有限であるとき，この関数は規格化可能と呼ばれることが多い．言葉使いをごく自然に拡張して，ノルムは無限大でもその固有微分が有限なノルムをもつような関数に対しては，同じようにこの形容詞を適用する．こうして，連続スペクトルの固有関数は，ヒルベルト空間には属さないけれども，とびとびのスペクトルの固有関数と同じように規格化可能となる．

性質（8）（これは二乗積分可能な関数 Φ と Ψ に対してだけ意味をもつ）を，固有関数ではなく，固有微分の方にうまく適用すれば，連続スペクトルに関するつぎの基本性質が得られ，それは §5 で証明されたとびとびのスペクトルの性質と対になる．

1°　固有値 $a(\nu)$ はすべて実数である．

2°　異なる固有値に対応する二つの固有関数は直交する．

ここで示される直交性は，第3章（42′）の一般化である．ただし内積 $\langle\phi_\nu, \phi_{\nu'}\rangle$ は一般に発散するから，直交性を

$$\langle\phi_\nu, \phi_{\nu'}\rangle = 0$$

と書くのは正確でない．しかし ν が領域 $(\nu', \nu'+\Delta\nu')$ の外にあるとき

$$\langle\phi_\nu, (\Delta\nu')^{-\frac{1}{2}}\int_{\nu'}^{\nu'+\Delta\nu'}\phi_{\nu''}\,\mathrm{d}\nu''\rangle = 0$$

が成り立つ．この性質を証明するのに重大な困難はないから，それを実行するのは読者に委ねる．

連続スペクトルの固有値が縮退していないときは，これらを

$$\langle \psi_\nu, \psi_{\nu'} \rangle = \delta(\nu - \nu')$$

となるように規格化することはいつでもできる．

固有値が縮退している場合も本質的な困難はない．結果を述べるにとどめよう．与えられた固有値に対して，縮退の性格により，あるときは有限個の，あるときは（可算または非可算）無限個の線形独立な固有関数が対応する．このような関数に目じるしをつけるために，有限個の値をとる指数，あるいは無限個のとびとびの値をとる一つまたは多くの指数，あるいは連続的に変わる一つまたは多くの指数，あるいはいくつかのとびとびの指数とともにいくつかの連続な指数が用いられる．話を具体的にするため，目じるしをつけるのにとびとびの指数 r と連続な指数 ρ, ν を使うことが必要であると仮定しよう．

固有関数 $\varphi^{(r)}(\nu, \rho)$ は，一般化された意味で直交規格化，すなわち

$$\langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \varphi^{(r')}(\nu', \rho') \rangle = \delta_{rr'} \delta(\rho - \rho') \delta(\nu - \nu') \tag{33}$$

となるようにとることがいつでもできる．とびとびのスペクトルに対する直交規格化固有関数 $\varphi_n^{(r)}$ と合わせて，これらの関数はエルミート演算子 A の固有関数の直交規格化系をつくる．そして A の任意の固有関数はこの系の関数の線形結合の形に表わされる．

波動関数 Ψ がこれらの関数の級数で表わされると仮定する．すなわち

$$\Psi = \sum_{n,r} c_n^{(r)} \varphi_n^{(r)} + \sum_r \int \gamma^{(r)}(\nu, \rho)\, \varphi^{(r)}(\nu, \rho)\, \mathrm{d}\nu\, \mathrm{d}\rho. \tag{34}$$

この展開における各固有関数の係数は，この等式の両辺に左から問題の固有関数を掛けて内積をとれば得られる．直交規格化関係を考えに入れると

$$c_n^{(r)} = \langle \varphi_n^{(r)}, \Psi \rangle, \tag{35 a}$$

$$\gamma^{(r)}(\nu, \rho) = \langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \Psi \rangle \tag{35 b}$$

となる．これらの関係から一般化されたパーセバルの関係

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = \sum_{n,r} |c_n^{(r)}|^2 + \sum_r \int |\gamma^{(r)}(\nu, \rho)|^2\, \mathrm{d}\nu\, \mathrm{d}\rho \tag{36}$$

が導かれる．

任意の波動関数（すなわち二乗積分可能な任意の関数）を（34）の形の展開で表わすことが可能であるとき，系 $\{\varphi\}$ は<u>完全な</u>直交規格化系であるといわれる．

一つの直交規格化系が完全であることをきわめて簡単に書き表わす方法がある．それは関数

$$\delta(q - q') = \delta(q_1 - q'_1)\, \delta(q_2 - q'_2) \cdots \delta(q_R - q'_R)$$

に対する展開 (34) を書くことである．この展開の係数を得るには，(35)，(36) の関数 $\Psi(q)\equiv\Psi(q_1, q_2, \cdots, q_R)$ に関数 $\delta(q-q')$ を代入すればよい．完全性と呼ばれるつぎのような関係が得られる(*)．

$$\delta(q-q') = \sum_{n,r}\varphi_n^{*(r)}(q')\,\varphi_n^{(r)}(q) + \sum_r\int\varphi^{*(r)}(\nu,\rho\,;q')\,\varphi^{(r)}(\nu,\rho\,;q)\,\mathrm{d}\nu\,\mathrm{d}\rho. \tag{37}$$

これと直交規格化関係

$$\langle\varphi_n^{(r)}, \varphi_{n'}^{(r')}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'} \tag{38 a}$$

$$\langle\varphi_n^{(r)}, \varphi^{(r')}(\nu,\rho)\rangle = 0 \tag{38 b}$$

$$\langle\varphi^{(r)}(\nu,\rho), \varphi^{(r')}(\nu',\rho')\rangle = \delta_{rr'}\,\delta(\rho-\rho')\,\delta(\nu-\nu') \tag{38 c}$$

とを合わせると，系 $\{\varphi\}$ が直交規格化かつ完全であるための必要十分条件が得られる．

展開 (34) と係数の正確な値 (35) を得るには，

$$\Psi(q) = \int\delta(q-q')\,\Psi(q')\,\mathrm{d}q'$$

と書き，$\delta(q-q')$ に (37) の右辺を代入すればよい．

完全直交規格化系は存在するとしても確かに一組でないことに注意する．実際，スペクトルが完全にとびとびであるときと同様につぎのことができる．

1°　各固有関数の位相を任意に変更すること．

2°　縮退した一つの固有値に対応する直交規格化関数の集合を，無限個の異なる方法で選ぶこと．

さらに，

3°　連続スペクトルの固有関数を規格化する際に，一つの任意性が入る．実際，任意の連続な指数 ν は指数 $\mu\equiv\mu(\nu)$ によって置き換えられる．ここで $\mu(\nu)$ は ν の関数として連続，微分可能，単調でありさえすれば何であってもよい(**)．規格化条件 (38 c) は指数 μ を含む類似の式に変わる．これが成り立つためには，新しい固有関数として

$$\varphi^{(r)}(\mu,\rho\,;q) = \left|\frac{\mathrm{d}\mu}{\mathrm{d}\nu}\right|^{-\frac{1}{2}}\varphi^{(r)}(\nu,\rho\,;q) \tag{39}$$

をとればよい．

(*) ［訳注］ relation de fermeture（英語 closure relation）を完全性と訳しておく．

(**) ［訳注］ 微分可能なら連続だから，《連続》と断わる必要はない．それよりも，$\mathrm{d}\mu/\mathrm{d}\nu$ が連続で $\neq 0$ であることがたいせつであろう．

すべてのエルミート演算子が固有関数の完全直交規格化系をもつわけではない[8]. それにもかかわらず，物理量を表わすことができるエルミート演算子はこれをもっている．それゆえこのような演算子は**オブザーバブル**と呼ばれる．あるエルミート演算子がオブザーバブルであることの証明は，多くの場合微妙な数学的問題である．最もありふれた場合，たとえば位置または運動量の座標，1次元の量子系のハミルトニアン，角運動量などについては，すでに証明がなされている．さらにこの性質はさきに述べた演算子の物理的解釈ときわめて密接に結びついているので，もしこれが誤りということになれば，この理論の形式を根本的に改めなければならないであろう．われわれはつねにこれが成り立つと仮定する．

§10. 一般の場合における測定結果の統計的分布

A はオブザーバブルであるとする．任意の二乗積分可能な Ψ に対して展開 (34) が存在するから，収束を条件として，各関数 Ψ に対する $F(A)$ という形の演算子の作用を定義することが可能である．

書き方を簡単にするために，A のスペクトルは縮退をもたないと仮定しよう．そうすれば

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n + \int \gamma(\nu)\, \varphi(\nu)\, d\nu \tag{40}$$

となる．級数 $\sum_n |c_n|^2$ と積分 $\int |\gamma(\nu)|^2 d\nu$ の収束することは，右辺の展開が収束するために必要十分な条件であることが示される．

まったく一般に，

$$F(A)\Psi = \sum_n c_n F(a_n)\, \varphi_n + \int \gamma(\nu)\, F(a_\nu)\, \varphi(\nu)\, d\nu$$

であり，この定義は

$$\sum_n |c_n|^2 |F(a_n)|^2 \qquad と \qquad \int |\gamma(\nu)|^2 |F(a_\nu)|^2 d\nu$$

が収束するときに意味をもつ．特に，演算子 $e^{i\xi A}$ の作用はつねにはっきり定義される．

---

[8] 半直線 $(0, +\infty)$ で定義づけされた二乗積分可能な関数 $\phi(x)$ に作用する演算子 $i(d/dx)$ を考えよう．$x=0$ のとき0になる関数に制限すれば，この演算子はエルミートである．事実この条件の下で，

$$\int_0^\infty \phi_1^* \left(i \frac{d}{dx} \phi_2 \right) dx - \int_0^\infty \left(i \frac{d}{dx} \phi_1 \right)^* \phi_2 dx = i \phi_1^* \phi_2 \Big|_0^\infty = 0.$$

しかし，これは固有解をもたない．なぜなら，可能な固有解は e^{-ikx} (固有値 k) の形のものだけであるが，これらは $x=0$ で0にならないからである．

というのは式

$$e^{i\xi A}\Psi = \sum_n c_n e^{i\xi a_n}\varphi_n + \int \gamma(\nu)\, e^{i\xi a_\nu}\varphi(\nu)\, d\nu \tag{41}$$

がつねに収束するからである.

A の分布の特性関数を決めるために，関係式

$$\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n} + \int |\gamma(\nu)|^2 e^{i\xi a_\nu}\, d\nu$$

を利用する．この式を得るには展開（40）および（41）と直交規格化関係を使えばよい．特性関数 $f(\xi)$ はつぎの式で表わされる：

$$f(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi\rangle}{\langle \Psi, \Psi\rangle} = \sum_n w_n e^{i\xi a_n} + \int \varpi(\nu)\, e^{i\xi a_\nu}\, d\nu.$$

ただし

$$w_n = \frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi\rangle}, \qquad \varpi(\nu) = \frac{|\gamma(\nu)|^2}{\langle \Psi, \Psi\rangle}. \tag{42}$$

この特性関数の形そのものから（注(6)），つぎのことが言える.

1°　量 $\mathcal{A}$ がとりうる値は，これに対応する演算子の固有値だけである.

2°　$\mathcal{A}$ がとびとびのスペクトルに属する値の一つ a_n をとる確率は w_n に等しい.

3°　$\mathcal{A}$ が区間 $[a(\nu), a(\nu+d\nu)]$ に含まれる連続スペクトルの値をとる確率は $\varpi(\nu)d\nu$ に等しい.

これらの確率の総和 $\sum w_n + \int \varpi(\nu)\, d\nu$ は確かに1に等しい（パーセバルの関係）．A の平均値が存在するとき，それはちょうど $\langle \Psi, A\Psi\rangle/\langle \Psi, \Psi\rangle$ に等しいことも同様に確かめられ，われわれが出発点とした基本要請に一致する.

スペクトルが縮退しているときも，量 w_n と $\varpi(\nu)$ に適当な修正を施こせば同じ結果が得られる．具体的に述べるために，展開 (40) の代りに展開 (34) をとれば，w_n と $\varpi(\nu)$ の定義はつぎのようになる.

$$w_n = \frac{\sum_r |c_n^{(r)}|^2}{\langle \Psi, \Psi\rangle} \tag{43}$$

$$\varpi(\nu) = \frac{\sum_r \int d\rho\, |\gamma^{(r)}(\nu, \rho)|^2}{\langle \Psi, \Psi\rangle}. \tag{44}$$

ここに書かれた限りでは，求める確率法則は表面上 A の固有関数の特殊な系を介して表わされている．この系の選び方には大きな任意性がある．しかし明らかに，確率法則も特性関数もこの選び方によらない．この性質を（43）と（44）について直接に確かめることも容易である（問題5）.

§11. 連続スペクトルのもう一つの扱い方

前の取り扱い方の長所は，形式的にきわめて簡明な点にある．この長所によって，δ《関数》の使用からくる数学的厳密性の欠除という損失は十分に償われている．その上，δ《関数》によって行なわれるすべての操作は，超関数の理論に訴えれば厳密なものに直される（付録Aを参照）．

しかし，もっと古典的な数学的処理に訴えて連続スペクトルの困難を乗り越えることもできる．これらすべての解析の基礎を固有値問題におき，必要ならばヒルベルト空間の外にある固有解まで取り入れる代りに，フォン・ノイマンの方法にしたがって，この問題を厳密にしかもヒルベルト空間からけっして出ないで取り扱うこともできる．この方法は，数学の言葉で言えば，ヒルベルト空間における1の分解を求め，波動力学の各オブザーバブルに特殊な1の分解が結びつけられることを示すのである．この扱い方は上に述べた扱い方と厳密に同値である．これについては読者の参考のためここで触れておく(9)．

連続スペクトルに関する問題を取り扱うもう一つの方法は，固有値問題（9）の代りに，固有値の列がまったくとびとびになるようなある別の問題を考え，適当にその条件を変えるとき，初めの問題があとの問題の極限の場合とみなされるようにすることである．このような処置が厳密性をもつと言うことはできないが，きわめて簡明で直観的に理解されるという長所がある．この方法によって演算子 q と $(\hbar/\mathrm{i})\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ を取り扱ってみよう．読者はこの取り扱いを §8のそれとくらべることができよう．

位置の測定問題を扱うために，区間 $(-\infty,\ +\infty)$ を長さ η の等しい小区間に分割し，各小区間で一定値をとる近似波動関数 $\psi^{\times}(q)$ によって波動関数 $\psi(q)$ を置き換える．q/η を越えない最大の整数を n_q とするとき，すなわち $q-\eta < n_q\eta \leqslant q$ とするとき，$\psi^{\times}(q)$ の値をつぎのように定める：

$$\psi^{\times}(q) = \psi(n_q\eta).$$

同様に，演算子 q を演算子

$$q^{\times} = (n_q\eta \text{ を掛ける})$$

に置き換える．$\eta\to 0$ となる極限において，$q^{\times}\to q$, $\psi^{\times}(q)\to\psi(q)$ となる．

関数 $\psi^{\times}$ の全体はヒルベルト空間をつくり，そこで演算子 $q^{\times}$ ははっきり定義され，固有値

$$n\eta \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots, \pm\infty)$$

のとびとびのスペクトルをもつ．各固有値 $n\eta$ には1に規格化された固有関数

$$u_n = \begin{cases} \eta^{-\frac{1}{2}} & (n\eta \leqslant q < (n+1)\eta \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{その他のとき}) \end{cases}$$

(9) 量子論の数学的側面に興味をもつ読者は，J. VON NEUMANN の前掲書（131頁）に完全な説明を見いだすであろう（注(8)）．

が対応する．固有関数 u_n は直交規格化関係

$$\langle u_n, u_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$$

を満たす．これらはさらに完全系をつくる．というのは，任意の関数 $\psi^\times$ が u_n の級数による展開で表わされるからである．

$$\psi^\times = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \eta^{\frac{1}{2}} \psi(n\eta)\, u_n. \tag{45}$$

そこで §5, §6 の理論を適用することができ，$q^\times = n\eta$ となる確率は $\eta\,|\psi(n\eta)|^2$ に等しいという結論を得る．

$\eta\to 0$ となる極限において，隣りあう固有値のあいだのへだたりは0に近づき，スペクトルは連続になる．0でない位置 $q' = n\eta$ の値は限りなく大きい n の値に対応する．しかし一方では，このような位置の正確な値を見いだす確率は η に比例し，したがって0に近づく．実際には，位置のスペクトルが連続であるからこの確率は重要でない．是非知らねばならないのは，粒子を区間 $(q', q'+\delta q')$ 内に見いだす確率 $P(q')\,\delta q'$，すなわち

$$P(q')\,\delta q' = \sum^{(q', q'+\delta q')} \eta\,|\psi(n\eta)|^2$$

である．ただし和は $n\eta$ が区間 $(q', q'+\delta q')$ 内に含まれるようなすべての n に対してとるものとする．$\delta q'$ は定数であるが十分小さいので，ここで加えられる項は実際上すべて $\eta\,|\psi(q')|^2$ に等しく，その個数は $\delta q'/\eta$ である．それゆえ，$\eta\to 0$ の極限において，

$$P(q')\,\delta q' = |\psi(q')|^2\,\delta q'.$$

展開 (45) はまた

$$\psi^\times = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \psi(n\eta)\,\frac{u_n}{\sqrt{\eta}}\times\eta = \sum_{q'} \psi(q')\, v_\eta(q')\times\eta$$

と書かれることに注意しよう．ここで $\sum_{q'}$ はとびとびの値の列 $q' = n\eta$ について加えることを意味し，

$$v_n(q') = \eta^{-\frac{1}{2}}\, u_n = \begin{cases} \eta^{-1} & (q-\eta < q' \leqslant q \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{その他のとき}) \end{cases}$$

である．$\eta\to 0$ のとき，級数は $\psi(q')$ と関数 $v_\eta(q')$ の極限との積の積分に近づく．この極限は正しく $\delta(q'-q)$ である．こうして展開 (32) がふたたび得られる．

運動量の測定についても，q の変域を領域 $(-L/2, +L/2)$ に制限することによって同じように取り扱うことができる．また，ここで L は最後には無限大に近づける量である．演算子 $p = (\hbar/\mathrm{i})\,\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ がこの有限な空間でエルミートであるためには，この区間の端において関数空間の関数 $\psi(q)$ に適当な条件をつける必要がある．実際，エルミートであるための条件は，どんな関数 $\varphi(q)$ と $\psi(q)$ についても

$$\int_{-L/2}^{+L/2} \varphi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}q}\right)\mathrm{d}q-\int_{-L/2}^{+L/2}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}q}\right)^*\psi\,\mathrm{d}q\equiv\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi^*\psi\Big|_{-L/2}^{+L/2}=0,$$

すなわちまた，

$$\frac{\psi\left(\frac{1}{2}L\right)}{\psi\left(-\frac{1}{2}L\right)}=\frac{\varphi^*\left(-\frac{1}{2}L\right)}{\varphi^*\left(\frac{1}{2}L\right)}=\text{定数}\ (\psi\text{と}\varphi\text{に無関係})$$

と書き表わされる．言いかえると，すべての関数 $\psi(q)$ に対して

$$\psi\left(\frac{1}{2}L\right)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\,\psi\left(-\frac{1}{2}L\right)$$

でなければならない．ここで $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ は位相の因数であり，一度決めたならば動かせない．これを1に等しくとることにすれば，周期条件

$$\psi\left(\frac{1}{2}L\right)=\psi\left(-\frac{1}{2}L\right)$$

が得られる．

こうしておけば，演算子 $(\hbar/\mathrm{i})\,\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ の固有値問題は容易に解かれる．固有値のスペクトルはとびとびのスペクトル

$$p_n=\frac{2\pi\hbar}{L}n\qquad(n=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm\infty)$$

である．固有値 p_n には1に規格化された固有関数

$$u_n=L^{-\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_nq/\hbar}$$

が対応する．

関数 u_n は互いに直交する．また，フーリエ級数論によれば，区間 $(-L/2,\ +L/2)$ で二乗積分可能な関数はいずれも，級数

$$\psi(q)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}c_n u_n \tag{46}$$

によって表わされるから，u_n は完全系をつくる．さらに

$$c_n=\langle u_n,\psi(q)\rangle=L^{-\frac{1}{2}}\int_{-L/2}^{+L/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_nq/\hbar}\,\psi(q)\,\mathrm{d}q$$

である．したがって§5，§6の理論を当てはめることができ，$p=p_n$ となる確率は $|c_n|^2$ に等しいことがわかる．

$L\to\infty$ となる極限において，隣りあう固有値のあいだの距離

$$\varepsilon=\frac{2\pi\hbar}{L}$$

は0に近づき，運動量のスペクトル $p_n = n\varepsilon$ は連続となる．極限に移るときの詳細は，b に対して行なったものとまったく同様である．$\varepsilon \to 0$ のとき，$p' = n\varepsilon$ は定数のままであり，$\varepsilon^{-1/2} c_n$ はフーリエ変換

$$\varphi(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q/\hbar} \psi(q)\,\mathrm{d}q$$

に近づく．この極限移行によって，運動量の測定値の統計的分布をもう一度見いだし，フーリエ級数（46）による $\psi(q)$ の表現が，フーリエ積分

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p')\, u(p';q)\,\mathrm{d}p'$$

に近づくことを示すのは読者に委ねよう．上の式において $u(p';q)$ は $\varepsilon^{-1/2} u_n$ の極限である．すなわち

$$u(p';q) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

§12. 注 釈 と 例

要約すれば，われわれは波動関数を与えることによって，一つの力学変数を測定した結果の統計的分布が，どのようにして完全に決められるかを示したのであった．とりわけ申し分のないのは，結果をまったく一般的な形で述べうることである．各力学変数に一つのオブザーバブル A，すなわち固有関数の完全な直交規格化系をもつエルミート演算子を結びつける．平均値に関するごく自然な，形式的にごく単純な要請から出発して，われわれが示したのは，測定の結果得られる値はオブザーバブルの固有値だけであること，また求める確率法則は，A の固有関数によって波動関数を展開したときの係数の絶対値の二乗に直接結びつけられるということである．

最もよく問題になる力学変数のうちで，位置座標と運動量の他に，シュレーディンガーのハミルトニアンによって表わされるエネルギーと角運動量に言及する必要がある．

エネルギーのスペクトルは場合により，純粋にとびとびのこともあり（第3章，§5を参照），純粋に連続のこともあり（第3章，§3を参照），混じっていることもある（第3章，§6を参照）．ハミルトニアン H の固有値問題が量子論において重要である理由は，エネルギーの定義と関係があるからというだけではなく，シュレーディンガー方程式を解くときにそれが大きな役割を演じるからである．Hが時刻に関係しないとき，エネルギーの概念が実質的な意味をもつのはこの場合だけであるが，時刻 t における波動関数の値 $\Psi(t)$ は初期時刻 t_0 における波動関数の値 $\Psi(t_0)$ から，演算

$$\Psi(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}\,\Psi(t_0)$$

によって導かれる．H の固有関数による $\Psi(t_0)$ の級数展開を使って，この等式の右辺を計算することができる（これは（41）の特殊な場合である）．またこの展開を利用すれば，

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}\,\Psi(t_0) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\Psi(t)$$

となるから，$\Psi(t)$ はシュレーディンガー方程式を満たし，そのうえ時刻 $t=t_0$ における初期条件も実際に満たしていることが容易に確かめられる．

複雑な書き方をすべて避けるために，H のスペクトルはまったくとびとびであり，縮退がないと仮定しよう．H の固有値を $E_n(n=1,2,\cdots)$ で表わし，対応する固有関数を ϕ_n とする．$\Psi(t_0)$ の展開を

$$\Psi(t_0) = \sum_n c_n\phi_n, \qquad c_n = \langle\phi_n, \Psi(t_0)\rangle$$

と書く．このとき関数 $\Psi(t)$ は

$$\Psi(t) = \sum_n c_n\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t-t_0)/\hbar}\,\phi_n \tag{47}$$

によって与えられる．この展開における ϕ_n の係数の絶対値が t に関係しないことに注意せよ．このことから興味ある性質を得る．ある系のエネルギーの統計的分布は（そのハミルトニアンが時刻に無関係なとき）時間的に一定である．

古典力学における1粒子の角運動量はベクトル $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ である．量子力学においては，ベクトル演算子

$$\boldsymbol{l} \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\boldsymbol{r}\times\nabla) \tag{48}$$

がこれに対応する．

この成分の一つを具体的に書くと，

$$l_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

極の軸として Oz をとり，粒子の極座標を（r, θ, φ）で表わそう．容易に確かめられるように $\partial/\partial\varphi = x\partial/\partial y - y\partial/\partial x$ である．したがって

$$l_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{49}$$

固有関数を極座標で書けば，l_z の固有値問題は特に簡単な形に表わされ，

$$l_z\phi(r,\theta,\varphi) \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\phi(r,\theta,\varphi) = l'_z\phi(r,\theta,\varphi).$$

これから，$F(r,\theta)$ を r と θ の任意の関数とするとき，

$$\phi(r,\theta,\varphi) = F(r,\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l'_z\varphi/\hbar}$$

が得られる．固有関数は $\boldsymbol{r}$ の一価関数であるから，φ を $\varphi+2\pi$ に変えるとき $\phi(r,\theta,\varphi)$

は同じ値をとらなければならない．それゆえ

$$l'_z = m\hbar \qquad (m \text{ は整数}). \tag{50}$$

したがって，1粒子の角運動量の成分のうちどの一つをとっても，固有値のスペクトルはまったくとびとびのスペクトルである．この結果は多粒子系の全角運動量の成分に対しても容易に拡張され，空間における量子化の実験的事実とよく一致する．

IV. 波動関数の決定

§13. 測定の操作と波束の収縮．理想測定

前の数節で定義した統計的分布は，直接実験にかけられる．たとえば，与えられた力学変数 $\mathcal{A}$ に関する分布は，きわめて多数 ($\mathcal{N}$ 個) の同じ系に対して $\mathcal{A}$ の測定を行なうときに得られる結果の分布である．この際，これらの系は互いに独立であり，測定の瞬間には同じ力学的状態にあるものとする．この瞬間[10]に各系は（一つの定数を除いて定められた）同じ波動関数 Ψ によって表わされ，これにははっきりと決まった理論的分布が対応する．これを実験的分布と比較することができる．

この理論の物理的解釈を完全なものにするためには，つぎのことを明らかにしなければならない．

i）一つの系に対して予め行なわれた観測から，どうしてその力学的状態を知ることができるか，特に，上で考えた $\mathcal{N}$ 個の系が実際にすべて Ψ で表わされる力学的状態にあることをどうして確かめるか．

ii）測定が終ったとき，これらの各系に何が起こるのか．

これら二つの問題は密接に結びついている．まず二番目を考えよう．

測定がつづけられている[11]時間を通じて起こることとは違って，測定が終ってしまうと，系は改めて測定装置から完全に切り離された一つの全体として取り扱われる．系の力学変数以外は入りこまない波動関数によって，系を記述することがふたたび可能になる．このような測定後の波動関数は確かに測定直前の波動関数と異なる．同じ関数になりうるのは，測定前の波動関数が，測定される量に対応するオブザーバブル A の固有関数にな

(10) ここで問題にしている瞬間は，測定開始の時刻である．測定が始まってしまうと，系は測定装置との相互作用に入り，系の波動関数だけでその変化を記述することはすべて不可能となる．

(11) 測定の機構そのものの詳細な検討は，この本の範囲外である．この問題に対しては，第4章，注(10)にあげた文献を見よ(131頁)．

っている場合だけである．このように測定の操作がもたらす波動関数の（因果関係によらない）変化は，しばしば波束の収縮と呼ばれる(*)．

因果関係によらないこの変化は，われわれも知っているように，系と測定装置との相互作用が系の変化のなかにひき起こす制御できない乱れとして現われ，その結果をおおざっぱに言えば，ある変数の測定が精密であればあるほど，それと相補的な変数の値をいっそう不確定にするものである．この制御できない乱れの他にも，測定が行なわれる過程でいくつかの変化がこの系に加えられるかも知れないが，これらはすべて原理的に計算できるものであり，両者をはっきり区別することがたいせつである．特に，測られる変数が測定操作の過程で変化するということもしばしば起こる．第4章における運動量の2種の測定はこのような状況の例である．測られる量の変化は，いうまでもなく使用される測定装置に関係する．たとえば，123頁で考察したコンプトン衝突による運動量の測定においては，光子の振動数 ν が小さくなるほど差 $p'-p$ が小さくなり，ν が限りなく小さくなる極限において0に近づく．測定操作の過程における系の力学的状態の変化は，どのように特殊な条件の下に測定が行なわれたかということにより1回ごとに異なるから，この変化に関する一般的な規則を立てることはできない．しかしわれわれは理想的な測定の条件を想像し，この条件の下では，いま暗に述べたばかりの正確に計算できる変化はすべて厳密に埋めあわされ，量子的現象に特有の制御できない乱れだけが介入すると考えることができる．われわれはこのような理想測定が実際に行なわれうること，あるいは少なくとも，実際に行なわれうる測定の極限の場合になっていることを承認する（例：第4章で論じた位置の測定において，測定時間が0になる極限の場合，コンプトン衝突による運動量の測定において，$\nu=0$ となる極限の場合）．

そこで量 $\mathcal{A}$ の理想測定を考え，まず初めに，縮退のない固有値 a_i が得られたとしよう．われわれの仮説により，測定が終ったときには $\mathcal{A}=a_i$ であること，したがって系の波動関数は（一つの定数を除いて）固有値 a_i に対応する固有関数 φ_i に等しいことをわれわれは確実に知っている．任意定数には何らの物理的意味もない，というのは，この系に対してその後どんな観測が行なわれようとも，これらの測定結果の統計的分布はこの定数の選び方によらないからである．それゆえ，測定後の系の波動関数は一意的に知られている．測定装置がある意味では《完全なフィルター》として働くのである．測定前の波動関数は関数 $\Psi=\sum_n c_n\varphi_n$ である．測定結果として a_i を見いだす確率は $|c_i|^2$ だけある．

(*)［訳注］ 波束の réduction を収縮と訳した．オブザーバブル A が位置座標の場合を考えると，測定で $q=q'$ という値が得られたとすれば，それまでの波動関数は，位置の固有関数 $\delta(q-q')$ に変わる．この場合はふつうの空間内での収縮である．

この結果が得られてしまうと，測定操作の効果は A の固有関数による Ψ の級数展開の一項 $c_i\psi_i$ だけをそのままゆがめずに《通過させた》ことになる．

もっと一般の場合として，オブザーバブル A の固有値，特に a_i の値が縮退しているときには，測定前の波動関数は（1に規格化されていると仮定し）

$$\Psi = \sum_p \Psi_p, \qquad \Psi_p = \sum_r c_p^{(r)}\phi_p^{(r)} \tag{51}$$

の形に書かれる（(20) を参照）．結果が a_i となる確率は $\langle\Psi_i, \Psi_i\rangle = \sum_r |c_i^{(r)}|^2$ だけある．理想測定の場合，測定後の波動関数は固有値 a_i に対応する A の固有関数，すなわち関数 $\phi_i^{(r)}$(r が動く）の線形結合である．しかしこの情報だけでは関数を一つに決めることはできないし，縮退が高位になるほど決め方は弱くなる．理想測定というのは，測定装置が《完全なフィルター》として働き，Ψ の展開（51）のうち固有値 a_i に関する部分すなわち関数

$$\Psi_i = \sum_r c_i^{(r)}\phi_i^{(r)}$$

だけをそのままゆがめずに《通過させ》，残りを通さない測定である．理想測定でない場合には，これらの項の《通過》に際してあるゆがみが伴う．このゆがみは原理上正確に計算され，測定に使う装置によって変わるものである．

この章の残りの部分で測定を考えるときはいつも理想測定であると仮定する．これですべての議論が非常に単純化される．事実上，ここで問題になっているのは本質的な制限ではなく，この理論を物理的に解釈するときには根本的な修正を施さずにこの制限を取り去ることもできる．

§14. 交換するオブザーバブルと共立変数

二つのオブザーバブル A, B を考えよう．これから述べる諸性質はまったく一般的なものであるが，固有値のスペクトルは完全にとびとびであると仮定する．これらが共通の固有関数 Ψ_0 をもっているとする．

$$A\Psi_0 = a\Psi_0, \qquad B\Psi_0 = b\Psi_0.$$

これら二つの等式の物理的意味はつぎのとおりである．物理系が与えられた時刻 t において状態 Ψ_0 にあるならば，量 $\mathcal{A}$ と $\mathcal{B}$ の精密な測定の結果はそれぞれ確実に a, b であろう．これら二つの等式が同時に成り立つための一つの必要条件は

$$(AB-BA)\Psi_0 \equiv [A, B]\Psi_0 = 0 \tag{52}$$

すなわち，A と B の交換子が固有値0に対する固有関数として Ψ_0 をもつことである．

この条件がけっして成り立たない例はオブザーバブル x と p_x の場合であり，これら

の交換子は0でない定数である（詳しくは第2章（10）を参照）.

$$[x, p_x] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[x, \frac{\partial}{\partial x}\right] = \mathrm{i}\hbar \neq 0 \tag{53}$$

であり，実際よく知られているように，これら二つの量を同時に正確に定めることはけっしてできない.

反対に，オブザーバブル A と B が交換するときには等式（52）が自動的に成り立つ. この場合に，重要な定理が得られる.

二つのオブザーバブルが交換するならば，それらは共通な固有関数の完全直交規格化系をもち，その逆も成り立つ.

この物理的な意味は，これら二つのオブザーバブルによって表わされる力学変数を，正確に同時に決定できるということである. すなわちこれらは共立（両立）する変数である. 特に，変数 $\mathcal{A}$ と $\mathcal{B}$ の理想測定を同時に行なうことが可能であり，この場合測定後の波動関数は A と B に共通の固有関数である.

この定理の直接的な証明はつぎのとおりである. まずオブザーバブル A と B が交換すると仮定する.

$$[A, B] = 0.$$

A の固有関数の一つを ψ_a とし，a をその固有値とする. ψ_a は B の固有関数から成る完全直交規格化系によって展開される. したがって

$$\psi_a = \sum_m \varphi(a; b_m)$$

という形に書かれ，$\varphi(a, b_m)$ は固有値 b_m に対する B の固有関数である. この和のなかに現われる各関数が異なる固有値に対応するように整理することはいつでもできる（(20)を参照）.

$$\hat{\varphi}_m \equiv (A-a)\,\varphi(a; b_m) = 0$$

であることを示そう. A と B は交換するから，

$$B\hat{\varphi}_m = (A-a)\,B\varphi(a; b_m) = (A-a)\,b_m\varphi(a; b_m) = b_m\hat{\varphi}_m$$

が得られる. ゆえに関数 $\hat{\varphi}_m$ は B の固有関数である. 対応する固有値はすべて異なるから，これらの関数は線形独立である. 一方では

$$\sum_m \hat{\varphi}_m = (A-a)\,\psi_a = 0.$$

これは関数 $\hat{\varphi}_m$ がすべて0であるときだけ成り立つ. 言いかえれば，関数 $\varphi(a; b_m)$ は同時に A と B の固有関数である.

ここで A の固有関数から成る完全直交規格化系 $\{\psi_n^{(r)}\}$ を考える.

$$A\psi_n^{(r)} = a_n\psi_n^{(r)}.$$

いま証明したばかりのことから，これらの関数は

$$\psi_n^{(r)} = \sum_m \varphi^{(r)}(a_n\,;b_m) \tag{54}$$

という形に書かれる．関数 $\varphi^{(r)}(a_n\,;b_m)$ は A と B に共通の固有関数である．固有値 a_n, b_m の同じ組に対応する関数 $\varphi^{(r)}(a_n\,;b_m)$ の全体は線形独立でないかもしれない．しかし同じ固有値の組に対応する直交規格化関数 $\chi^{(s)}(a_n\,;b_m)$ の列を適当に（たとえばシュミットの直交化の方法によって）選び，関数 $\varphi^{(r)}(a_n\,;b_m)$ をこれらの関数の線形結合

$$\varphi^{(r)}(a_n\,;b_m) = \sum_s c_{rs}\chi^{(s)}(a_n\,;b_m) \tag{55}$$

とすることはつねに可能である．こうしてつくられた関数 χ 全体の集合 $\{\chi\}$ は A と B に共通な固有関数の直交規格化系を構成する．さらに，任意の波動関数 Ψ が χ の級数に展開されるから，これは完全系である．この展開をつくるには，完全系 $\{\psi_n^{(r)}\}$ の関数によって Ψ を級数に展開し，この展開に現われる関数 $\psi_n^{(r)}$ のところを，$\chi^{(s)}(a_n\,;b_m)$ による表現で置き換えればよい．この表現は (54) と (55) を使って得られる．　（証明終）

逆に，A と B が共通な固有関数 $\chi^{(s)}(a_n\,;b_m)$ の完全直交規格化系をもつならば，

$$AB\chi^{(s)}(a_n\,;b_m) = a_n b_m \chi^{(s)}(a_n\,;b_m) = BA\chi^{(s)}(a_n\,;b_m).$$

したがって

$$[A, B]\chi^{(s)}(a_n\,;b_m) = 0$$

が成り立つ．系 $\{\chi\}$ に属するすべての関数に対して交換子 $[A, B]$ の作用は0である．仮定により，任意の波動関数 Ψ は χ の級数に展開されるから，どんな関数 Ψ に対しても $[A, B]\Psi = 0$ を得る．それゆえ

$$[A, B] = 0.$$

$f(x, y)$ を任意に選ばれた実関数とするとき，交換するオブザーバブル A, B を使って，$f(A, B)$ という形の新しいオブザーバブルをつくることができる．定義として，A と B に共通な固有関数 $\chi(a\,;b)$ に対する $f(A, B)$ の作用は

$$f(A, B)\chi(a\,;b) = f(a, b)\chi(a\,;b)$$

とする．任意の関数 Ψ に対する作用を得るには，Ψ を χ の級数に展開し，この展開の各項に演算子 $f(A, B)$ を適用する．この際，級数の収束することを条件とし，これが満たされなければ $f(A, B)\Psi$ は存在しない．明らかに，定義のしかたそのものから，$f(A, B)$ も A および B と共通な固有関数の完全直交規格化系 $\{\chi\}$ をもち，したがって $f(A, B)$ は A および B と交換する．

これらの結果はすべて，二つずつ交換する任意の R 個のオブザーバブルに対しても容易

に拡張される．R 個のオブザーバブルが二つずつ交換するならば，それらは共通な固有関数の完全直交規格化系を（少なくとも）一組もち，逆も成り立つ．また，これらのオブザーバブルの任意の（実）関数は，これらのすべてと交換するオブザーバブルであり，同じ固有関数系をもつ．

§15. 交換するオブザーバブルの完全集合

オブザーバブル A を考えよう．その固有関数によって固有関数の完全直交規格化系をつくることができる．これからはそれを A の基底系と呼ぶ．一般に，この基底系はただ一つとは限らない．この系を選び出すときに任意性の生じる部分は §9 で論じた．二つの系に属する関数が位相と（連続スペクトルの場合に）規格化だけを異にするとき，二つの系は便宜上同じものとみなす．この規約の下に，A の固有値のどれにも縮退がないとき，A の基底系はただ一つである．そうでない場合，考えを具体的にするために，固有値 a が二重に縮退しているとし，これに対する二つの直交規格化固有関数を ψ_1, ψ_2 としよう．容易に確かめられるように，関数

$$\varphi_1 = \psi_1 \cos\alpha + \psi_2 \sin\alpha, \qquad \varphi_2 = -\psi_1 \sin\alpha + \psi_2 \cos\alpha$$

もまたそうである．それゆえ A の基底系をつくるには，組 (ψ_1, ψ_2) を使っても (φ_1, φ_2) を使ってもよい．そこで A の基底系がただ一つでないと仮定する．A と交換する一つのオブザーバブルを B とする．A と B に共通な基底系が存在することは §14 で証明したが，これはただ一つであるかもしれない．そのとき，A と B は交換するオブザーバブルの完全集合をつくるという．

A と B がただ一つの共通な基底系をもたないときには，双方と交換する三番目のオブザーバブル C を付け加えることにする．以下同様．

一般に，オブザーバブル $A, B, \cdots, L$ が共通な基底系をただ一つだけもつとき，これらは交換するオブザーバブルの完全集合をつくるという．この場合，集合に属する各オブザーバブルと交換する任意のオブザーバブルは，必ずこの系を基底系とする．したがってその固有値は，オブザーバブル $A, B, \cdots, L$ の固有値 $a, b, \cdots, l$ の関数として確定する．言葉をかえると，このオブザーバブルは集合に属するオブザーバブルの関数と考えられる．

交換するオブザーバブルの完全集合に属するオブザーバブルにより表わされる力学変数は，すべて同時に正確に値を定めることが可能であり，それらはまた共立変数の完全集合(第4章，§17)をつくる．これらの変数がとる値の正確な測定を同時に行なうならば，この系の波動関数はオブザーバブル $A, B, \cdots, L$ の固有関数であり，測定操作によって見いだされた固有値 $a, b, \cdots, l$ に対応するものであることが保証される．この性質をもつ固有関数はただ一つしかないから，これらの測定値を与えることによって物理系の波動関数は

完全に定められる．系の力学的状態は量子数 $a, b, \cdots, l$ を与えることによって完全に定められるとも言う．実際には，この関数は定数を除いて決められるだけである．物理的に測定可能な量と言えば，可能ないろいろの測定結果の統計的分布だけであり，それらはこの定数の選び方によらないから，これを任意に定めても波動関数の物理的意味を変えることはない．ふつうは，この関数を1に規格化するが，物理的意味のない位相についてはなお任意性が残される．

物理実験の経過は，つぎのように言い表わされる．初期時刻 t_0 に系を準備するのであるが，そのためにはこの系の共立変数の完全集合について同時測定を行なう．これでその力学的状態が時刻 t_0 において完全に決定される．

この準備が終ると，系の波動関数は時間の経過とともにシュレーディンガー方程式により正確に決められたとおりに変化してゆく．それゆえ，その後の各瞬間において，少なくとも測定装置の介入によって乱されない限り，系の力学的状態は完全に知られている．たまたま，その後のある時刻 t に，与えられた測定を行なうとする．測定がなされる瞬間において波動関数 $\Psi(t)$ は正確に知られているから，測定結果の統計的分布は正確に予想される．きわめて多数 $\mathcal{N}$ 個の同じ系について実験を繰り返せば，実験的分布が得られ，これを上記の理論的分布とくらべることができる．

§16. 純粋な場合と混合の場合

実際上は，いま述べたような系の完全な《準備》はまれにしか実行されない．多くの場合，準備の際に測られる力学変数は完全集合をつくらない．それゆえ，系の力学的状態は正確には知られない．このような場合には，統計の方法に頼らなければならない．決まった力学的状態の代りに，多くの状態の統計的な混合を取り扱い，確定した一つの波動関数を系に結びつける代りに，波動関数の統計的な混合をそれに結びつけ，各関数には統計的に決められた重みをつける．古典統計力学があるのと同じように，量子統計力学が存在するわけである．

準備が完全であり，したがって系の力学的状態（一つの波動関数で表わされる）が正確に知られているとき，われわれは純粋な場合を取り扱っていると言う．この反対は統計的な混合の場合であり，準備が不完全であることを示す．

混合の場合に行なわれる測定の結果を予想するときには，統計が2回入ってくる．第一は測定操作のあいだに系の受ける制御できない乱れに結びついた，純粋に量子的理由によるものであり，第二は系の力学的状態が完全には知られていないという理由によるものである．

系が準備された時刻 t_0 において，系は波動関数 $\Psi^{(1)}(t_0), \cdots, \Psi^{(k)}(t_0), \cdots$ の集合によっ

て表わされ，それぞれ統計的な重み $p_1, \cdots, p_k, \cdots (\sum_k p_k = 1)$ がつけられていると仮定する．初期条件 $\Psi^{(1)}(t_0), \cdots, \Psi^{(k)}(t_0), \cdots$ に対応するシュレーディンガー方程式の解をそれぞれ $\Psi^{(1)}(t), \cdots, \Psi^{(k)}(t), \cdots$ とする．時刻 t において，系はこれらの関数 $\Psi^{(1)}(t), \cdots, \Psi^{(k)}(t)$, $\cdots$の集合で表わされ，それぞれ同じ統計的な重み $p_1, \cdots, p_k, \cdots$ がつけられている．系が力学的状態 $\Psi^{(k)}(t)$ にあるとき，与えられた量 $\mathcal{A}$ の測定をこの系に対して行なった場合の結果の平均を $\langle A\rangle_k$ としよう．すなわち

$$\langle A\rangle_k = \frac{\langle \Psi^{(k)}(t), A\Psi^{(k)}(t)\rangle}{\langle \Psi^{(k)}(t), \Psi^{(k)}(t)\rangle}.$$

統計的な混合の場合に対して，時刻 t に行なわれる $\mathcal{A}$ の測定結果の平均値は

$$\langle A\rangle = \sum_k p_k \langle A\rangle_k$$

によって与えられる．同様に，系の力学的状態が $\Psi^{(k)}(t)$ で表わされるとき，結果 a_i を得る確率が $w_i^{(k)}$ であるとすれば，混合の場合に対して時刻 t に同じ測定を行なって，この結果を得る確率は

$$w_i = \sum_k p_k w_i^{(k)} \tag{56}$$

である．

量子的な統計的混合の非常に重要な場合は，温度 T のサーモスタットによって系が熱力学的平衡状態にある場合である．起こりうるいろいろな力学的状態は，系のハミルトニアン H の固有状態である．おのおのの固有状態の重みは，それに対応する H の固有値だけで決まる．規格化定数を除けば，それはボルツマンの因数 $\mathrm{e}^{-E/kT}$ に等しく，E は H の固有値，k はボルツマンの定数である．

V. 交換子の代数とその応用

§17. 交換子の代数と基本交換子の性質

互いに交換するオブザーバブルだけを取り扱っているあいだは，ふつうの代数の法則を自由に利用することができる．しかしながら，与えられた量子系のオブザーバブルがすべてこの性質をもつとは限らない．もっと詳しく言えば，R 次元の量子系のオブザーバブルは，位置のオブザーバブル $q_i(i = 1, 2, \cdots, R)$ と運動量のオブザーバブル $p_i(i = 1, 2, \cdots, R)$ との関数[12]であり，これらがすべて互いに交換するわけではない．q と p との交

(12) 実は，このことが成り立つのは，量子系が古典的な類似をもつときに限られる．のちに，われわれは補助的な変数としてスピン変数を導入することになるが，これは古典的な類似をもたない．

換子はこの理論で基本的な役割を演じる．これらは

$$[q_i, q_j] = 0, \qquad [p_i, p_j] = 0, \tag{57}$$

$$[q_i, p_j] = \mathrm{i}\hbar\,\delta_{ij}. \tag{58}$$

関係 (57) は明らかであり，特に二番目は微分演算が互いに交換するという事実から得られる．関係 (58) は (53) の一般化である．それを得るには，演算子 p を具体的に

$$p_i = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q_i}$$

と書けばよい．

q と p とが互いに交換しないという事実から力学変数 $\mathcal{A} \equiv A(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)$ を正確に定義するためには，この関数 $A(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)$ の具体的な表現において q と p の順序を確定しておくことが要求される．実際の場合，A を p の多項式——ときには p のべき級数——の形に書き，その係数を q の関数とする．各項は成分 p_i と q の関数とをある順序に並べて掛けたものである．関数 A を演算子と考えるときには，各項における掛け算の順序をはっきり決めておかなければ A が決まらない．

q や p と，与えられた関数 A との交換子を調べるのは興味深い．q だけの関数あるいは p だけの関数についてはつぎの関係が得られる．

$$[q_i, F(q_1, \cdots, q_R)] = 0 \tag{59}$$

$$[p_i, G(p_1, \cdots, p_R)] = 0 \tag{60}$$

$$[p_i, F(q_1, \cdots, q_R)] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial F}{\partial q_i} \tag{61}$$

$$[q_i, G(p_1, \cdots, p_R)] = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i}. \tag{62}$$

関係 (59) と (60) は §14の終りに述べた性質の特別な場合である．(61) を証明するには，演算子 p_i を具体的に書いて，任意の波動関数に両辺を作用させた結果が同じであることを確かめればよい（第2章 (9) を参照)．等式 (62) を証明するには，運動量空間において類似の確かめ方をすればよい．$\Psi(q_1, \cdots, q_R)$ に対応する運動量空間の波動関数を $\Phi(p_1, \cdots, p_R)$ とすれば，$q_i\Psi(q_1, \cdots, q_R)$ に対応する運動量空間の関数は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\Phi(p_1, \cdots, p_R)$$

であることを思い出しておく．

交換子の代数の法則を使っても，同じ結果に到達する．ここでは四つの主要な法則をあげる．これらの規則は交換子の定義そのものから得られる．実際に確かめることは読者に委ねよう．任意の三つの演算子を A, B, C とするとき，

$$[A, B] = -[B, A] \tag{63}$$

$$[A, B+C] = [A, B]+[A, C] \tag{64}$$

$$[A, BC] = [A, B]C+B[A, C] \tag{65}$$

$$[A, [B, C]]+[B, [C, A]]+[C, [A, B]] = 0. \tag{66}$$

法則 (65) を繰り返し適用すると，

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}$$

を得る．特に1次元の系に対して

$$[q, p^n] = n\,\mathrm{i}\hbar\, p^{n-1}.$$

これから (62) は F が p の任意の累乗のときに確かめられ，したがってまた F が多項式のときにも（法則 (64)），あるいはもっと一般に p の収束べき級数のときにも確かめられる．

q と p を含む一般の関数に対してもまた

$$[p_i, A] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial A}{\partial q_i} \tag{67}$$

$$[q_i, A] = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial A}{\partial p_i} \tag{68}$$

と書くことができる．ただし $\partial A/\partial q_i$, $\partial A/\partial p_i$ は A の偏導関数によって定められ，その具体的な表現式のなかで，p と q の順序は適当に選ばれているものとする．

このことを1次元の量子系に関する例について説明しよう．$f(q)$ は q の関数とする．q と三つの関数 $p^2 f(q)$, $pf(q)p$, $f(q)p^2$ との交換子は，三つともこれらの関数の p に関する導関数と（因数 $\mathrm{i}\hbar$ を除いて）同じものになるが，これらは同じ演算子ではない．実際は（(62) を繰り返し適用して）

$$[q, p^2 f(q)] = 2\mathrm{i}\hbar\, pf(q), \quad [q, pfp] = \mathrm{i}\hbar(fp+pf), \quad [q, fp^2] = 2\mathrm{i}\hbar\, fp.$$

同様に

$$[p, p^2 f] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} p^2 f', \quad [p, pfp] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} pf'p, \quad [p, fp^2] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} f'p^2.$$

§18. 角運動量の交換関係

交換子の代数の法則 (63)—(65) の応用として，1粒子の角運動量

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

を考え，その成分の交換子を計算する．

$$\begin{aligned}[l_x, l_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \qquad \text{法則 (64)} \\ &= y[p_z, z]p_x + p_y[z, p_z]x \qquad \text{法則 (65)} \\ &= \mathrm{i}\hbar(xp_y - yp_x) = \mathrm{i}\hbar\, l_z\end{aligned}$$

となり，他の二つの交換子も添字 x, y, z を順送りに交換することによって計算される．したがって

$$[l_x, l_y] = \mathrm{i}\hbar\, l_z, \quad [l_y, l_z] = \mathrm{i}\hbar\, l_x, \quad [l_z, l_x] = \mathrm{i}\hbar\, l_y \tag{69}$$

を得る．角運動量の三つの成分は互いに交換しない．これらのうちのどの二つに対しても，共通な完全直交規格化系は存在しない．言いかえれば，角運動量の二つの成分を正確に同時に定めることは一般に[13]できない．

他方（法則（65）），

$$[l_z, l_x^2] = \mathrm{i}\hbar(l_y l_x + l_x l_y), \quad [l_z, l_y^2] = -\mathrm{i}\hbar(l_y l_x + l_x l_y), \quad [l_z, l_z^2] = 0$$

であることに注意しよう．両辺をそれぞれ加えると（法則（64）），

$$[l_z, l^2] = 0 \tag{70}$$

となる．ここで演算子

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 \tag{71}$$

はベクトル l の長さの二乗である．

演算子 l^2 と l_z とは交換する．したがってこれらは同時に正確に定められる．(l^2, l_x) と (l^2, l_y) の組が同じ性質をもつことも明らかである．

§19. 統計的分布の時間的変化．運動の定数

シュレーディンガー方程式とその複素共役な方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -(H\Psi)^*$$

をとろう．初期時刻に Ψ が1に規格化されているならば，その後の各瞬間においてもそのままである．与えられたオブザーバブル A の平均値は各瞬間において内積

$$\langle A\rangle = \langle \Psi, A\Psi\rangle = \int \Psi^* A\Psi\, \mathrm{d}\tau$$

に等しく，

---

[13] 《一般に》という言葉はたいせつである．三つの成分は基底系を共有しないけれども，$l_x = l_y = l_z = 0$ に対する関数を共通の固有関数としてもつ．これらは長さ $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ だけに関係し，ベクトル r の方向に関係しない関数である．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t},\ A\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi,\ A\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \Psi,\ \frac{\partial A}{\partial t}\Psi \right\rangle$$

を得る．A が時間を直接に含まないときは，右辺の第3項が0になる．

シュレーディンガー方程式と，ハミルトニアンのエルミート性を考えに入れて計算すれば，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle H\Psi, A\Psi\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle \Psi, AH\Psi\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

$$= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle \Psi, [A, H]\Psi\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle.$$

これから，A の平均値の時間的変化を示す一般の方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \langle [A, H]\rangle + \mathrm{i}\hbar\left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \tag{72}$$

を得る．

A を演算子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi A}$ に置き換えれば，A の統計的分布の特性関数の時間的変化に対する類似の方程式が得られる．

特に，オブザーバブル C がハミルトニアンと交換し

$$[C, H] = 0,$$

また時間を直接に含まないならば，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle C\rangle = 0$$

という結果を得る．C の平均値が時間的に一定なのである．もっと一般に，C が H と交換するならば関数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi C}$ もまた H と交換し，したがって

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi C}\rangle = 0.$$

特性関数，したがってオブザーバブル C の統計的分布は時間的に一定なのである．

古典解析力学との類似によって，C は運動の定数と呼ばれる．特に，初期時刻における波動関数が，与えられた固有値 c に対する C の固有関数であるならば，この性質は時間が経過しても保たれる．c は《良い量子数》であるという．特に H が直接に時間を含まず，系の力学的状態が時刻 t_0 において H と C に共通な固有関数によって表わされるときには，波動関数は位相の因数を除いて，時間の経過とともに変わらない．エネルギーと変数 C の値もはっきり決まっており，時間的に一定である．

§20. 運動の定数の例．エネルギー．偶奇性

ハミルトニアンとつねに交換するオブザーバブルは存在する：ハミルトニアンそのものである．したがってハミルトニアンが直接に時間を含まない系に対してはいつでもエネルギーが運動の定数となる．この結果はすでに §12 で示されたものである．

もう一つ起こりうる運動の定数として，偶奇性をあげておく（第3章，§14 を参照）．偶奇性と名づけるのは，

$$P\psi(q) = \psi(-q)$$

によって定義されるオブザーバブル P のことである．容易に確かめられるように，P はエルミートである．また，$P^2 = 1$ であり，したがって P の固有値として可能な値は $+1$ と -1 だけである．$+1$ には偶関数が対応し，-1 には奇関数が対応する．

q を $-q$ に代えてもハミルトニアンが変わらないとき，明らかに

$$[P, H] = 0$$

である．事実，もし

$$H\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}, q\right) = H\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}, -q\right)$$

ならば，任意の $\psi(q)$ に対して，確かに

$$PH\psi = H\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}, -q\right)\psi(-q) = H\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}, q\right)\psi(-q) = HP\psi.$$

これらの条件の下に，もしも波動関数が一定の偶奇性を与えられた初期時刻にもつならば，時間が経過しても同じ偶奇性を保つ．

この性質は，任意の次元数をもつ系に対しても容易に拡張される．特に多粒子系がこの性質をもち，この場合，偶奇性の演算は空間の反転（$\boldsymbol{r}_i \to -\boldsymbol{r}_i$）に対応し，偶奇性のオブザーバブルは

$$P\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots\cdots) = \Psi(-\boldsymbol{r}_1, -\boldsymbol{r}_2, \cdots\cdots)$$

によって定義される．

演習と問題

1. 内積の性質 a)，b)，c)（§2，123頁参照）だけに基づいてシュワルツの不等式 $|\langle\varphi, \psi\rangle| \leqslant \sqrt{\langle\varphi, \varphi\rangle\langle\psi, \psi\rangle}$ を証明せよ．（φ と ψ の任意の線形結合を考え，そのノルムが必ず正または0であることを式に書けばよい．）両辺のあいだに等号が成り立つのは，関数 φ と ψ のうち一方が他方のスカラー倍になっているときであり，またそのときに限る．このことを示せ．

2. 区間 $(-\infty, +\infty)$ で定義された関数 $\psi(q)$ に作用する演算子 $p=(\hbar/\mathrm{i})\mathrm{d}/\mathrm{d}q$ の固有値問題を考えよ．スペクトルは連続であり，固有関数は無限大のノルムをもつことを確かめよ．近くにある固有値に対応する固有関数を重ね合わせることによって，ノルム有限の関数（固有微分）をつくることができ，これに対して標準偏差 Δp はいくらでも小さくできることを示せ．同じ問題を演算子

$$\frac{p^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2}$$

について考えよ．

3. 区間 $(-\infty, +\infty)$ でノルムの有限な関数 $\psi(q)$ に作用する演算子 q を考える．a) パラメータ η によって定まる連続関数の列をつくり，そのノルムと平均値 $\langle q\rangle$ とは η に無関係で，η が 0 に近づくとき標準偏差 Δq が 0 になるようにせよ（この型の列はきわめて多数存在する）．この列はヒルベルト空間の関数に収束しないことが確かめられる．b) 同じようにして，パラメータ δq によって定まる固有微分（これらはノルムの有限な関数であるが連続ではない）の列をつくれ．これらは，区間 δq 内にある固有値 q_0 に対応する固有《関数》$\delta(q-q_0)$ を重ね合わせて得られる．また，この固有微分に関する標準偏差 Δq も同じ性質をもつことを確かめよ．

4. 与えられた量を測定するとき，この物理量を表わす演算子の固有関数から完全直交規格化系を選ぶ方法は，非常に大きな任意性をもつにもかかわらず，測定値の統計的分布はただ一通りに定められることを確かめよ（任意性は，固有関数の位相を選ぶとき，縮退した一つの固有値に対する固有関数を選ぶとき，連続スペクトルの固有関数を規格化するときに起こる）．

5. どのようにして本章の式 (20) と (21) は連続スペクトルの場合に拡張されるか．

6. 極座標 (r, θ, φ) によれば 1 粒子の角運動量の成分 l_z は $(\hbar/\mathrm{i})\,\partial/\partial\varphi$ の形をとる．このことは，l_z と φ が相補変数の対をつくることを暗示している．しかし，不確定性関係 $\Delta l_z\,\Delta\varphi \gtrsim \hbar$ は意味をもたない．その理由を説明せよ．$\Delta l_z=0$ のとき角 φ は完全に不確定であることを示せ．波束

$$\psi(\varphi)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\sigma(\varphi-\varphi_0+2n\pi)^2\right]$$

を l_z の固有関数によって級数に展開せよ．この例につき，φ の不確定さと l_z の不確定さを比較し，これら二つの変数の相補的性格を論ぜよ．

第6章　古典近似と WKB 法

I．波動力学の古典的極限

§1．概　　説

$\hbar \to 0$ とする極限において，量子力学の法則は古典力学の法則に帰着しなければならない．この理論の建設にきわめて重要な役割を果たした対応原理は，まさに上の基本的要求に答えることを目標としてきた．

それゆえ，作用量子が無限小とみなされる状況の下では，いつでも古典力学が諸現象の十分な記述を与えるはずである．本章の目標は，どのような状況の下に，またどの程度まで，この古典近似が正しいかを詳しく説明することである．

$\hbar$ の有限性を明らかに示すことの一つは，あるオブザーバブルに対してとびとびの固有値スペクトルが存在することである．隣りあう固有値間のへだたりは $\hbar$ 程度である[1]．古典近似が正当化されるためには，このへだたりが無視できるほど小さいことを必要とする．こうなるのは，大きな量子数が現われるときである．対応原理に基づくこの条件は，前期量子論においてリュードベリの定数を計算し，ボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則をつくるとき（第1章 §13, §15），すでに用いられている．これは確かに十分条件ではない．たとえば，不確定性関係のように純粋な量子的効果でありながら，あるスペクトルがとびとびであるという性質とは結びつかないものもある．もっと一般的に言えば，古典近似が成り立つ条件とは幾何光学の条件なのである．

古典近似は異なる二つの方法によって定式化される．

第一の方法は直観的に最もわかりやすいもので，与えられた時刻における各粒子の力学的状態をその位置と速度によって定めるものである．もし $\hbar$ が0ならば，この方法は厳密に正当化されよう．なぜなら，各粒子の位置と運動量の成分は互いに交換するオブザーバ

(1)　たとえば，水素原子の場合 $E_n = -(1/2)(e^2/\hbar c)^2 mc^2/n^2$, $\varDelta E = E_{n+1} - E_n = -(2n+1)/(n+1)^2 \cdot E_n$. $\hbar \to 0$ とする極限において，与えられたエネルギー準位 $E_n = E$ からすぐ隣りまでのへだたりは $(2n+1)/(n+1)^2 \cdot E$. この極限移行で，$n^2\hbar^2 =$ 定数，ゆえに $1/\hbar$ と同程度に $n \to \infty$ となり，$\varDelta E \sim O(1/n) = O(\hbar)$.

ブルによって表わされることになるからである．実際は，0でない交換子

$$[q_i, p_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \tag{1}$$

が存在することによって，位置と運動量とを同時に定めるとき到達しうる精度に一つの限界，すなわち不確定性関係によって与えられる限界が設けられる．系の力学的状態は波動関数によってまったく厳密に表わされ，最大限われわれにできることは，$\Delta q_i \Delta p_i = \hbar/2$ となるような最小の波束をつくることである．古典的な像では各粒子に位置と運動量を与えるが，この値はそれぞれ対応する量子的状態における位置と運動量の平均値に等しくとればよい．平均値のまわりの偏差はすべて無視するのがたてまえである．この像が満足できるものであるためには，つぎのことが必要である．

a）平均値がよい近似で古典的運動法則にしたがうこと．

b）取り扱う問題そのもののスケールにくらべて，波束のスケールが小さく，この状態が時間の経過とともに変わらないこと．

これらの点についてはつぎの§2, §3で論じよう．特に，どのような波束も，きわめて特殊な状態にあるものを除けば，時間の経過とともに限りなく《ひろがって》ゆき，十分長い時間ののちには，いくらでも大きな空間の部分を占めるに至るということを知るであろう．それゆえ上に定めた古典像は時間の間隔を有限にしない限り，けっして正しくない．

古典近似を定式化する第二の方法は，問題の系を多くの古典系の統計的混合とみなすものである．もっと詳しく言えば，波動関数を使って古典系の統計的混合をつくり，配置空間の各点における古典系の密度は，同じ点に量子系が存在する確率に等しいと定め，さらに，$\hbar \to 0$ となる極限において，この混合系の変化が古典力学の予想にしたがうことを示すのである．これは§4で行なう．数学的見地に立てば，この定式化 (2) はシュレーディンガー方程式の極限として古典力学の方程式を与えるから，前の定式化より満足すべきものである．この古典近似が成り立つ条件はまさに幾何光学のそれである．

この近似は，シュレーディンガー方程式の近似解法でWKB法 (3)(*) と呼ばれているも

(2)　古典系の統計的混合を波動関数から定める方法はただ一つではないから，実際はいくつかの異なる定式化がある（問題4を参照）．§4で与えられるのは最も簡単なものである．

(3)　WKB法の技巧は，波動の伝播の問題を解くため，L. レイリーによってもたらされた (1912)．これを初めて量子力学に適用したのはH. ジェフリーズである (1923)．これはさらにL. ブリュアン，H. A. クラーマース，G. ヴェンツェルによって同時に発展させられた (1926)．

(*)［訳注］　原書ではBKW法となっているが，英語や日本の慣習ではWKB法と呼ぶので，本書でもWKB法とした．アルファベットの順に並べればフランス人のBrillouinが先頭にくるから，フランスでBKWとするのはもっともである．

のと密接に結びついている．この方法が適用されるのは，いくつかの特異点を囲む空間の領域を除いた残りで，シュレーディンガー方程式をその極限である古典的な式に置き換えることができる場合である．WKB 法は本章第II節で説明する．

§2. エーレンフェストの定理

エーレンフェストの定理は，量子系の座標 q の平均値とそれに共役な運動量 p の平均値が時間とともに変化する法則を与える．この定理によれば，これらの平均値の変化の方程式は古典力学のハミルトン方程式と形式的に同じであり，ただ古典方程式の両辺に現われる量をその平均値に置き換えることが必要とされるにすぎない．

この定理は一般の方程式（第5章(72)）を位置と運動量に適用すればただちに得ることができる．位置の（デカルト）座標を $q_1, \cdots, q_R$，共役な運動量を $p_1, \cdots, p_R$，系のハミルトニアンを $H(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)$ とする．

第5章の（72）によって

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle q_i\rangle = \langle[q_i, H]\rangle, \qquad i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p_j\rangle = \langle[p_j, H]\rangle.$$

右辺の交換子の計算は第5章で行なった（第5章の（67），（68））．よって求める結果は[4]

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle q_i\rangle &= \left\langle\frac{\partial H}{\partial p_i}\right\rangle \qquad (i = 1, 2, \cdots, R) \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p_j\rangle &= -\left\langle\frac{\partial H}{\partial q_j}\right\rangle \qquad (j = 1, 2, \cdots, R). \end{aligned} \tag{I}$$

方程式系（I）とハミルトンの正準方程式系との結びつきをはっきり捕えなければならない．平均値 $\langle q_i\rangle$ と $\langle p_j\rangle$ が古典力学の法則にしたがうというのは，一般に正確でない．古典量 q_i と p_j の時刻による変化率は $\partial H/\partial p_i$, $-\partial H/\partial q_j$ であり，これらの量の関数としてはっきり決まっている．これらの量の時間的変化は，初期時刻における値を与えることによって完全に決められる．一方，方程式（I）によれば，変化率 $\mathrm{d}\langle q_i\rangle/\mathrm{d}t$, $\mathrm{d}\langle p_j\rangle/\mathrm{d}t$ はある平均値に等しいのであり，これらの平均値を計算するためには一般に波動関数 $\Psi(t)$ を知っていなければならない．平均値 $\langle q_i\rangle$, $\langle p_j\rangle$ が古典運動方程式にしたがうのは，（I）の右辺にある“関数の平均値”を“平均値の関数”に，すなわち

$$\left\langle\frac{\partial}{\partial p_i} H(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)\right\rangle \text{ を } \frac{\partial}{\partial p_i} H(\langle q_1\rangle, \cdots, \langle q_R\rangle; \langle p_1\rangle, \cdots, \langle p_R\rangle) \text{ に} \tag{2a}$$

$$\left\langle\frac{\partial}{\partial q_j} H(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)\right\rangle \text{ を } \frac{\partial}{\partial q_j} H(\langle q_1\rangle, \cdots, \langle q_R\rangle; \langle p_1\rangle, \cdots, \langle p_R\rangle) \text{ に} \tag{2b}$$

---

[4] 演算子 $\partial H/\partial p_i$, $\partial H/\partial q_j$ の定義についてはいくつかの注意を必要とする（173ページを参照）．

置き換えることが許される場合だけである．ハミルトニアンがqとpに関する2次式である場合（自由粒子，調和振動子，定常な電場または磁場内の荷電粒子，問題1と2を参照）を除けば，この置き換えは厳密な意味においては正しくない．このような特殊の場合を別にして，これが行なわれるのは，qとpの平均値のまわりに生じる偏差が無視されるときに限る．

一例として，ポテンシャルのなかにある1粒子の場合を考えよう．

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r).$$

ここで力

$$F=-\operatorname{grad} V(r)$$

を導入する．この場合，エーレンフェストの方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle r\rangle=\frac{\langle p\rangle}{m},\qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle=\langle F\rangle,$$

すなわち

$$\langle F\rangle=m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle r\rangle \tag{3}$$

となって，ニュートン方程式の量子的な類似の式である．

平均位置

$$\langle r\rangle\equiv\int\Psi^*(r,t)\,r\,\Psi(r,t)\,\mathrm{d}r$$

が本当にニュートンの古典方程式にしたがうためには，(3) において力の平均値

$$\langle F\rangle=\int\Psi^*(r,t)\,F(r)\,\Psi(r,t)\,\mathrm{d}r$$

を，点 $\langle r\rangle$ における力の値 $F(\langle r\rangle)$ に置き換えることが許されなければならない．力が0であるとき（自由粒子），あるいはrの座標の線形関数であるとき（調和振動子）には，厳密に $\langle F\rangle=F(\langle r\rangle)$ を得る．そうでない場合，この置換が許されるのは，波動関数が十分小さい空間の領域に局在し，その結果この領域の各点で力が事実上定数値をとるときに限る．

§3. 波束の運動と拡散

波束の運動が古典粒子の運動と同じようにみなされるためには，まずその位置と運動量が古典力学の法則にしたがうことが必要である．しかし波束の大きさが各瞬間において十分小さいこともまた必要である．事実，エーレンフェストの定理から察せられるように，

第二の要請なしに第一の要請が満たされることはほとんどない．何よりもまずわれわれは第二のほうに注意を向けよう．

本質的な事実を引き出すためには，1次元の波束 $\psi(q,t)$ を調べれば十分である．ハミルトニアン H を

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(q)$$

とする．

時間的変化を調べたい量は，平均値 $\langle q\rangle$ と $\langle p\rangle$ およびその偏差の二乗

$$\chi\equiv(\Delta q)^2=\langle q^2\rangle-\langle q\rangle^2,\qquad \varpi\equiv(\Delta p)^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2$$

である．古典近似では，この波束は1粒子を表わし，その位置と運動量はそれぞれ

$$q_{\mathrm{cl.}}=\langle q\rangle,\qquad p_{\mathrm{cl.}}=\langle p\rangle$$

である(5)．この古典粒子のエネルギー

$$E_{\mathrm{cl.}}=\frac{\langle p\rangle^2}{2m}+V(\langle q\rangle)$$

は平均値 $\langle H\rangle$ に等しくないことに注意しよう．実際，古典近似が成り立つとすれば，$E_{\mathrm{cl.}}$ は時間に対して一定であり，差

$$\varepsilon=\langle H\rangle-E_{\mathrm{cl.}}\tag{4}$$

も同様である．

波束のひろがり $\sqrt{\chi}$ は小さい範囲にとどまるから，$\langle q\rangle$ の近くでは $V(q)$，$V'(q)$ のような関数をそのテイラー展開，すなわち

$$V(q)=V_{\mathrm{cl.}}+(q-\langle q\rangle)V'_{\mathrm{cl.}}+\frac{1}{2}(q-\langle q\rangle)^2V''_{\mathrm{cl.}}+\cdots\tag{5}$$

$$V'(q)=V'_{\mathrm{cl.}}+(q-\langle q\rangle)V''_{\mathrm{cl.}}+\frac{1}{2}(q-\langle q\rangle)^2V'''_{\mathrm{cl.}}+\cdots\tag{6}$$

に置き換えるのが自然である．

この式のなかで，$V_{\mathrm{cl.}}$，$V'_{\mathrm{cl.}}$，… は関数 V，V'，… が点 $q=\langle q\rangle$ においてとる値を表わす．これらの量の平均値をとることによって，ある意味では平均値の χ によるべき級数展開，すなわち

$$\langle V\rangle=V_{\mathrm{cl.}}+\frac{1}{2}\chi V''_{\mathrm{cl.}}+\cdots\tag{7}$$

$$\langle V'\rangle=V'_{\mathrm{cl.}}+\frac{1}{2}\chi V'''_{\mathrm{cl.}}+\cdots\tag{8}$$

が得られる．この展開を使って，まったく一般的な結果が得られ，それは $V(q)$ の形に関

(5) 第2章で1次元の波束を調べたときには，波束の中心を定常位相の条件によって定義し，一方ここで採用した定義は平均値 $\langle q\rangle$ である．古典近似において，これら二つの定義の差は無視される．

係なく成り立つ.

量 $\langle q\rangle$ と $\langle p\rangle$ はエーレンフェストの方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle q\rangle=\frac{\langle p\rangle}{m} \tag{9 a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle=-\langle V'\rangle \tag{9 b}$$

にしたがう.

方程式 (9 b) の右辺がその展開 (8) の初項に置き換えられるならば，これらは古典方程式と同じである．そうなるのは，$\chi V'''_{\mathrm{cl.}}/2$ の項とそれより高位の項が無視できる場合である．$V'''(q)$ がいたるところで0のとき，すなわち $V(q)$ が q についてたかだか2次の多項式であるとき，特に $V(q)=cq^2$ (調和振動子) のときと $V(q)=0$ (自由粒子) のときには，上記のことが厳密に成り立つ．そうでないとき，展開 (8) における V''' およびそれより高階の導関数の影響が十分小さいためには，波束のひろがり $\chi^{1/2}$ 程度の距離に対して $V(q)$ の変動が十分ゆるやかでなければならない.

この条件が満たされているとすれば (それはまた展開 (7) と (8) がはやく収束することにもなるが)，定数 ε (式 (4) を参照) に対して式

$$\varepsilon\equiv\frac{\varpi}{2m}+\langle V\rangle-V_{\mathrm{cl.}}\simeq\frac{1}{2m}(\varpi+mV''_{\mathrm{cl.}}\chi)=\text{定数} \tag{10}$$

が得られ，偏差の二乗 ϖ と χ がこれによって結ばれる.

それゆえ，時刻の関数として χ の変化だけを調べよう．χ は演算子 $q^2-\langle q\rangle^2$ の平均値である ($\langle q\rangle$ は時刻の関数であるから，この演算子は直接に時刻に関係する)．関係式 (第5章(72))をこの演算子に適用して計算した結果は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi=\frac{1}{m}(\langle pq+qp\rangle-2\langle p\rangle\langle q\rangle)$$

となる．$\mathrm{d}\chi/\mathrm{d}t$ について同じように計算すれば,

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}t^2}=\frac{2\varpi}{m^2}-\frac{1}{m}(\langle V'q+qV'\rangle-2\langle q\rangle\langle V'\rangle).$$

右辺の括弧のなかの演算子 V' をその展開 (6) のはじめの2項に置き換えれば，近似式

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}t^2}\simeq\frac{2}{m^2}(\varpi-mV''_{\mathrm{cl.}}\chi) \tag{11}$$

が得られ，これは (10) を考えに入れると

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}t^2}\simeq\frac{4}{m}(\varepsilon-V''_{\mathrm{cl.}}\chi) \tag{12}$$

と書かれる.

初期時刻 t_0 における偏差 χ_0, ϖ_0 と $\dot{\chi}_0=\mathrm{d}\chi_0/\mathrm{d}t$ を知れば，——$V''_{\mathrm{cl.}}$ が時刻に関係することに注意を払って——方程式 (12) を解くことにより，それ以後の各瞬間における χ

が得られ，(10) によって ϖ が得られる．こうすれば，方程式 (9b) の $\langle V' \rangle$ を $V'_{\mathrm{cl.}}$ に置き換えたことによって生じる誤差が評価される．すべての要素がこのように結びつけられ，それによって波束を古典粒子とみなすことの可否が決定される．

最も興味があるのは，調和振動子と自由粒子の二つの場合であって，これらの場合においては波束の中心の運動が古典粒子の運動と厳密に同じである．調和振動子の場合 ($V = m\omega^2 q^2/2$) には，$\langle q \rangle$ は0を中心として $\omega/2\pi$ の振動数で振動し，χ は $\varepsilon/m\omega^2$ を中心としてその倍の振動数で振動する（問題1を参照）．

自由粒子 ($V = 0$) について言えば，$\langle q \rangle$ は $\langle p \rangle/m$ の速さで一様な直線運動を行ない，偏差 ϖ は厳密に定数値 ($\varpi = \varpi_0 = 2m\varepsilon$) を保ち，また，((11)，(12) がこの場合は厳密に成り立ち) まったく厳密な式 $\mathrm{d}^2\chi/\mathrm{d}t^2 = 2\varpi_0/m^2$ が得られるから，

$$\chi = \chi_0 + \dot{\chi}_0 t + \frac{\varpi_0}{m^2} t^2. \tag{13}$$

その結果，十分長い時間ののちには，χ はいくらでも大きくなる．つまり自由波束は限りなく《拡散する》．

無制限な拡散が存在するということは重要な事実である．なぜならこのことによって，波束を古典粒子と同一視しうる期間に一つの制限がおかれるからである．事実，調和振動子のようなきわめて特殊な場合を除けば，波束の拡散はいつでも生じるものであり，特に衝突の問題においていちじるしい．この場合，われわれが散乱の中心から十分遠くで扱う以上，波束の変化の法則は自由波束のそれに近づく．

自由波束のひろがりが初期時刻において最小になること（第4章の問題4を参照）すなわち $\varpi_0 \chi_0 = \hbar^2/4$（この場合 $\dot{\chi}_0 = 0$）を仮定すれば，その拡散法則は簡単になる．この仮定の下では，単に

$$\chi = \chi_0 + \frac{\varpi_0}{m^2} t^2$$

と書かれ，また

$$\Delta q = \left[(\Delta q_0)^2 + \left(\frac{\Delta p_0}{m} t \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \tag{14}$$

となる．

《拡散項》$\Delta p_0 t/m$ の形そのものからこの自由波束に対して簡単な古典像を描くことができる．それは初め平均値 $\langle q_0 \rangle$ のまわりの幅 Δq_0 の範囲にむらがった一群の放物体で，これら放物体の速度は波束の群速度 $v = \langle p_0 \rangle/m$ を中心として幅

$$\Delta v = \Delta p_0/m$$

の範囲に分布している．これらの速度がまちまちであるために，初めは同じところにいた

放物体も，時間 t ののちには幅 $t\Delta v$ の範囲に一様に散らばる．それゆえ，放物体の群は初めのようにかたまっていることができず，群の幅 Δq は法則（14）にしたがってはっきり増加してゆく．

同じ法則をまた別の形に書き表わすこともできる．特に

$$\Delta q = \Delta q_0 \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{D\lambda\!\!\!^-}{(\Delta q_0)^2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

と書かれ，ここで $D \equiv vt$ は時間 t のあいだに波束の動く距離，$\lambda\!\!\!^- \equiv \hbar/mv$ は平均波長を表わす．それゆえ自由波束の拡散は，

$$\sqrt{D\lambda\!\!\!^-} \ll \Delta q_0 \tag{15}$$

のとき無視できる．また，容易に示されるように，ひろがり Δq はつねに長さ $\sqrt{D\lambda\!\!\!^-}$ より大きい（注意：$D\lambda\!\!\!^- = \hbar t/m$）．

§4. シュレーディンガー方程式の古典的極限

ここで，本章のはじめに述べた古典近似の定式化のうち，第二のほうを調べよう．

具体的に考えるために，一個の粒子がポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかにある場合を取り扱う．その波動関数を絶対値と位相に分離する．

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = A(\boldsymbol{r}) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S(\boldsymbol{r})\right). \tag{16}$$

（16）をシュレーディンガー方程式に代入し，実部と虚部に分けると，二つの方程式

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\triangle A}{A} \tag{17}$$

$$m \frac{\partial A}{\partial t} + (\nabla A \cdot \nabla S) + \frac{A}{2} \triangle S = 0 \tag{18}$$

を得る．

これら二つの方程式はシュレーディンガー方程式と厳密に同値である．さらに，方程式（18）は連続の方程式（第4章(11)）に他ならない．実際，粒子の確率密度 $P(\boldsymbol{r})$ と流れの密度 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})$（第4章 §2，§4 を参照）は

$$P = A^2, \qquad \boldsymbol{J} = A^2 \frac{\nabla S}{m}$$

によって与えられる．ところで，（18）の両辺に $2A$ を掛けると，これは

$$m \frac{\partial}{\partial t} A^2 + \mathrm{div}\,(A^2 \nabla S) = 0 \tag{19}$$

という形になる．

古典近似は方程式（17）において$\hbar$を消したものである．すなわち

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V=0. \tag{20}$$

これからつぎの結果を得る：

古典近似においては，Ψ が記述するのは，相互に作用をおよぼすことなく（統計的混合），ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ にしたがって動く質量 m の古典粒子の流体である．空間の各点における流体の密度およびその流れの密度は，各瞬間において，それぞれこの点における量子的粒子の確率密度 P および確率の流れの密度 $\boldsymbol{J}$ に等しい(6)．

実際，この流体の連続方程式は満たされている（式（19））から，この流体の速度の場

$$\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{J}}{P}=\frac{\nabla S}{m} \tag{21}$$

が上に述べた古典流体の運動法則に正しくしたがうことを示せばよい．ところで，定義（21）によると，方程式（20）は

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{mv^2}{2}+V=0$$

と書かれる．左辺のグラディエントを0と書けば，（21）を考えに入れて，

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\cdot\mathrm{grad})\right)m\boldsymbol{v}+\mathrm{grad}\,V=0$$

となり，これから流体の粒子は運動方程式

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=-\,\mathrm{grad}\,V$$

にしたがうという結論が得られる． （証明終）

この結果はきわめて一般的であり，何次元の系に対しても成り立つということを強調する必要がある．密度 $P=|\Psi|^2$ は配置空間においてはっきり定められた関数である．同様に，流れ $\boldsymbol{J}$ はこの空間においてはっきり定められたベクトル場である．一般の場合の証明を繰り返すのは読者に委ねる．

Ψ がエネルギー E の定常状態を表わすとき，

$$\frac{\partial A}{\partial t}=0, \qquad \frac{\partial S}{\partial t}=-E.$$

方程式（17）と（18）は

(6) 配置空間の各点にはっきり決まった運動量 ∇S が対応しているから，〔各粒子を位相空間内の点で表わした場合に〕この統計的混合を表わす位相空間内での点の分布の密度はずい分特殊なものである．方程式 (20) の解 S は，古典力学のハミルトン＝ヤコビによる定式化において用いられるハミルトンの《主関数》である．

$$(\nabla S)^2-2m(E-V) = \hbar^2\frac{\triangle A}{A} \tag{22}$$

$$\mathrm{div}\,(A^2\nabla S) = 0 \tag{23}$$

となる．古典近似においては，(22) の右辺が無視され，上に証明した結果が成り立つ．このとき Ψ は古典粒子の流体の定常流を表わす．

この流体力学による類推よりも，なおいっそう示唆に富むのが光学による類推であり，定常解に対しては特にそうである．粒子の速度は S のグラディエントに比例するから，これらの粒子の軌道は等位相面 (S = 定数) に直交する．光学の言葉を使えば，この面は波面であり，粒子の軌道は光線に一致する(7)．それゆえ，古典近似はそのまま幾何光学による近似である．シュレーディンガー方程式の結果として，物質波の理論の基礎となった要請がもう一度見いだされるのである．

古典近似が成り立つための条件が実際に満たされているかどうかを確かめたいときには，光学による近似がいつでもきわめて有効である．波長の $1/2\pi$ 倍を $\lambdabar$ とすると，

$$\lambdabar = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V(\boldsymbol{r}))}}.$$

これは $\boldsymbol{r}$ の関数として確定する．方程式 (22) は

$$(\nabla S)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambdabar^2}\left(1+\lambdabar^2\frac{\triangle A}{A}\right) \tag{22'}$$

という形に書かれる．古典近似においては，全空間で

$$\lambdabar^2\frac{\triangle A}{A} \ll 1 \tag{24}$$

が仮定されている．もっと詳しく言えば，この条件が満たされない範囲が十分に小さく，方程式 (22′) を近似方程式

$$(\nabla S)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambdabar^2} \tag{25}$$

に置き換えられる程度でなければならない．この式は幾何光学における波面の方程式である．

---

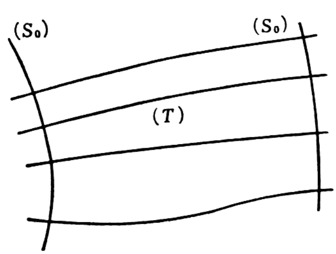
(7) ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ があるときには，古典速度の定義 (21) を

$$\boldsymbol{v} = \frac{1}{m}\left(\nabla S-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)$$

に変えなければならない．この新しい定義をとっても，上に証明した定理はそのまま成り立つ．波面と光線の概念も意味をもつが，光線は波面と直交しなくなる．これは異方性媒質における幾何光学の場合と似た状況である．

全空間で $V=0$ の場合には，$\lambda\!\!\!^{-}$ は定数であり，長さ $\hbar/\lambda\!\!\!^{-}$ の任意のベクトルを $\boldsymbol{p}$ とするとき，関数 $S=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}+$定数 は方程式 (25) の特殊解である〔この型の関数の全体は，上の1階偏微分方程式の完全解を構成する〕．この解に対応する波面は $\boldsymbol{p}$ に垂直な平面であり，光線は $\boldsymbol{p}$ に平行な直線である．一般の場合には波面も光線も曲がっている．

エネルギー E を固定すると，一つの波面 $S(x,y,z)=S_0$ を与えることによって方程式 (25) の解がただ一つだけ定まる．この解はつぎのようにしてつくられる．面 (S_0) には，古典粒子の軌道の（パラメータを二つもつ）一群が結びつけられ，それらの軌道はエネルギー E に対応し，(S_0) に直交する．その他の波面はこれらの軌道に直交する面である (6•1 図)．これらの波面の一つ一つの上で S がとる値を求めるには，軌道の一つ (T) を考える．(T) の各点は曲線座標 s によって表わされる．原点 $s=0$ は (T) と (S_0) との交点に定める．方程式 (25) によって



6•1 図　幾何光学的近似 $(\nabla S)^2=\hbar^2/\lambda\!\!\!^{-2}$ において，波面 (S_0) に対応する（与えられたエネルギー E の）軌道の一群．

$$S(s)=S_0+\int_0^s\frac{\hbar}{\lambda\!\!\!^{-}}\,\mathrm{d}s$$

となり，これによって S の値は全空間で定められ，面 (S_0) 上で A の値を与えると，全空間における関数 A の値が一意的に定められる．事実，方程式 (23) は一つの軌道に沿って A がとる値 $A(s)$ のあいだの関係だけを与える．実際，それは

$$\frac{\hbar}{\lambda\!\!\!^{-}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}(A^2)+A^2\triangle S=0$$

と書かれる．関数 $\lambda\!\!\!^{-}$ と $\triangle S$ は，この軌道の上で s の関数として確定しているから，(T) と (S_0) との交点における値 $A(0)$ が知られれば，この方程式によって $A(s)$ は一意的に定められる．

古典近似における解 A と S とがわかれば，厳密な方程式 (22′) が項 $\lambda\!\!\!^{-2}\triangle A/A$ を含むことから生じるずれを評価することができる．結果はただ波が伝わる媒質の《光学的性質》によるばかりでなく，考えている波動方程式の解によっても変わる．一般的な法則として，波の《断面の》ひろがりが $\lambda\!\!\!^{-}$ にくらべていたるところで大きく，また全空間とはいわないまでも，ともかく密度 A^2 が無視できない値をとる範囲では

$$|\operatorname{grad}\lambda\!\!\!^{-}|\ll 1 \qquad (26)$$

が成り立つならば，古典近似は正しい．

この有効条件は，つぎのように半定量的な議論から導かれる．光学からの類推が示すように，光線すなわち粒子軌道の曲率は波長のスケールにくらべて小さくなければならな

い．一方，曲率半径 R は粒子の速さ v および力の法線成分 $-(\mathrm{grad}\,V)_\perp$ と関係

$$\frac{mv^2}{R} = |(\mathrm{grad}\,V)_\perp|$$

によって結びつけられる．それゆえ

$$\frac{\lambda\!\!\!^{-}}{R} = \frac{\lambda\!\!\!^{-}\,|(\mathrm{grad}\,V)_\perp|}{mv^2} = \frac{m\lambda\!\!\!^{-3}}{\hbar^2}|(\mathrm{grad}\,V)_\perp| \ll 1$$

であることが必要である．$\lambda\!\!\!^{-}$ をポテンシャル V の関数として表わす式を考えに入れると，この条件は

$$|(\mathrm{grad}\,\lambda\!\!\!^{-})_\perp| \ll 1$$

と書かれる．こうして，波面の曲率は（たかだかいくつかの制限された空間領域，特に焦面の近くを除けば）$1/\lambda\!\!\!^{-}$ にくらべて小さくなければならない．このことは面 (S_0) を適当に選びさえすれば，軌道が上と同じ性質をもつときには一般に成り立つ．同様に，各波面上での A の相対的変化は，$\lambda\!\!\!^{-}$ 程度の領域で無視される大きさでなければならない．言いかえれば，波の《断面の》ひろがりは $\lambda\!\!\!^{-}$ にくらべて大きくなければならない．解に関するこの条件が満たされていると仮定すれば，軌道 (T) に沿う関数の値 $A(s)$ はおおよそ

$$A(s) \simeq A(0)\sqrt{\frac{\lambda\!\!\!^{-}(s)}{\lambda\!\!\!^{-}(0)}}$$

によって与えられる．これから簡単な計算によって，

$$\lambda\!\!\!^{-2}\frac{\triangle A}{A} \simeq \frac{\lambda\!\!\!^{-2}}{A}\frac{\mathrm{d}^2 A}{\mathrm{d}s^2} \simeq \frac{1}{4}\left(2\lambda\!\!\!^{-}\frac{\mathrm{d}^2\lambda\!\!\!^{-}}{\mathrm{d}s^2} - \left(\frac{\mathrm{d}\lambda\!\!\!^{-}}{\mathrm{d}s}\right)^2\right)$$

が得られる．この項が小さいためには，$\mathrm{d}\lambda\!\!\!^{-}/\mathrm{d}s$ と $\lambda\!\!\!^{-}\mathrm{d}^2\lambda\!\!\!^{-}/\mathrm{d}s^2$ が1よりずっと小さいことを必要とする．実際には，第一の条件が満たされれば第二の条件はつねに満たされる．言いかえれば，軌道に沿う $\mathrm{grad}\,\lambda\!\!\!^{-}$ の成分が1よりはるかに小さければよい．すなわち

$$|(\mathrm{grad}\,\lambda\!\!\!^{-})_\parallel| \ll 1.$$

§5. クーロン散乱への応用．ラザフォードの式

応用として，クーロン散乱の古典理論とその有効条件について簡単に説明しよう．

それは，力の中心 C から粒子までの距離を r とするとき，クーロン・ポテンシャル

$$V = \frac{Ze^2}{r}$$

による質量 m の粒子の散乱問題である．たとえばこの粒子は電荷 e の陽子であり，それが電荷 Ze の原子核からクーロン力（斥力ポテンシャル）を受けている．この理論は電荷の符号が反対のとき（引力ポテンシャル）にも同様に適用される．それゆえ定数 Ze^2 はどちらの符号をも取りうる代数的な量として取り扱う．

粒子のエネルギー E は，

$$E=\frac{p_0^2}{2m}=\frac{1}{2}mv_0^2$$

とはっきり決まっており，入射粒子の伝播方向も決まっているから，衝突パラメータ b を与えることによって運動の初期条件は完全に決まる．

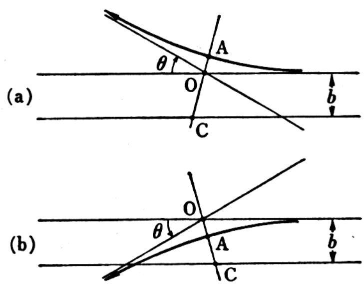
$$a=\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{E} \tag{27}$$

と置く．軌道は双曲線の一つの分枝であり（6•2 図），その焦点は C，軸の半長 OA は $|a|$，焦点までの距離 OC は $\sqrt{a^2+b^2}$ であることが知られている．偏向角は

$$b=|a|\cot\frac{\theta}{2} \tag{28}$$

という関係によって与えられる（偏向角の向きはポテンシャルの符号によって変わるけれども，絶対値の等しいポテンシャルに対しては，この角の絶対値も同じである）．

実際上知る必要のある重要な量は微分断面積 $d\sigma/d\Omega$ である．すべて同じエネルギー E と同じ初期方向をもつ粒子のビームが力の中心に衝突すると考えよう．知りたいのは決まった立体角 $(\Omega, \Omega+d\Omega)$ 内に散乱される粒子の個数である．粒子が入射ビームのなかに一様に分布し，単位時間に対する流束が一定で 1 に等しい場合，すなわち入射線上でCから十分遠くに入射の方向に垂直な任意の面をとったときこの面の単位面積を単位時間に 1 個の割合で粒子が横切る場合に，あらかじめ定めた方向に散乱される粒子の個数を単位立体角および単位時間について数えたものを $d\sigma/d\Omega$ の定義とする．



6•2 図　クーロン場における粒子の軌道（太線）．a）斥力，b）引力．

入射方向を極座標の軸にとり，散乱粒子の伝播方向を極座標の角 θ と φ で表わす．θ はちょうど上に述べた偏向角であり，それは関係式 (28) によって衝突パラメータ b と結びつけられている．(θ, φ) 方向にある立体角 $d\Omega$ は

$$d\Omega=\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

に等しい．単位時間にこの立体角のなかに散乱される粒子の個数 $d\sigma$ は，面 $b\,db\,d\varphi$ を単位時間に通過する入射粒子の個数に等しい．すなわち，入射流束は 1 に等しいから，

$$d\sigma=b\,db\,d\varphi=b\frac{db}{d\theta}d\theta\,d\varphi=\frac{b}{\sin\theta}\frac{db}{d\theta}d\Omega.$$

この式のなかの量 b および $db/d\theta$ を，関係式 (28) によって計算し，θ の関数として表わした上で代入すれば，ラザフォードの式[8]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{a^2}{4\sin^4\dfrac{\theta}{2}}=\frac{(Ze^2)^2}{16E^2\sin^4\dfrac{\theta}{2}} \tag{29}$$

を得る．

われわれに残されているのは，古典近似の利用を根拠づけることである．$|a|$ がこの衝突問題を特徴づける長さであることに注意する．一方，この粒子の波長

$$\lambda\!\!\!^{-}=\frac{\hbar}{p}=\frac{\hbar}{p_0}\left(1-\frac{2a}{r}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

は，その初期値 $\lambda\!\!\!^{-}_0=\hbar/mv_0$ 程度の大きさをもつ．それゆえ二つの量 $|a|$ と λ との比は

$$\gamma=\frac{|a|}{\lambda\!\!\!^{-}_0}=\frac{|Ze^2|}{\hbar v_0} \tag{30}$$

程度である．古典近似は

$$\gamma\gg 1 \tag{31}$$

となる極限において成り立つことが予想される．

どの程度まで条件 (26) が満たされるかを調べよう．それは

$$|\mathrm{grad}\,\lambda\!\!\!^{-}|=\left|\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dr}\right|=\frac{1}{\gamma}\frac{a^2}{\sqrt{r(r-2a)^3}}\ll 1$$

となる．r が小さくなるにつれて $|\mathrm{grad}\,\lambda\!\!\!^{-}|$ は大きくなる．偏向角が大きくなるほど古典的軌道は散乱の中心に近づくから，古典近似は小さな偏向角（すなわち大きな衝突パラメータ）に対して正しく，大きな角に対しては正しくなくなるという結論が得られる．もっと定量的な結論に達するために，$|\mathrm{grad}\,\lambda\!\!\!^{-}|$ の最大値（すなわち双曲線軌道の頂点における値）を θ の関数として表わしてみる．計算の結果は，

$$|\mathrm{grad}\,\lambda\!\!\!^{-}|_{\max}=\frac{F(\theta)}{\gamma},\qquad F(\theta)=\tan\frac{1}{2}\theta\,\frac{\sin\frac{1}{2}\theta}{1-(\mathrm{sgn}\,a)\sin\frac{1}{2}\theta}$$

となる〔$\mathrm{sgn}\,a\equiv|a|/a$ と規約する〕．θ が0から π まで増すとき，$F(\theta)$ は0から $+\infty$ まで増す．θ_c を

$$F(\theta_c)=\gamma$$

となるような角とすると，古典近似は $\theta<\theta_c$ のあいだ正しく，$\theta>\theta_c$ のとき正しくなくなる．γ が大きくなるほど θ_c は π に近づくことに注意する．これは先に述べた大体の

---

(8) ラザフォードによるこの式は歴史的にきわめて重要である．α 粒子の散乱に関する彼の有名な実験の解釈はすべてこの式に基づくからである．

予想と一致する.

II. WKB 法[3][9]

§6. この方法の原理

この方法は, $\hbar$ のべき級数展開を導入し, $\hbar^2$ より高位の項を無視することにある. それゆえ（少なくとも空間のある部分では）, シュレーディンガー方程式がその古典的極限の形に置き換えられる. しかしこの方法は, 本来の古典近似よりもはるかにひろい範囲に適用される. というのは, 古典的解釈が無意味になるような空間の領域（古典粒子が到達できない領域 $E<V$）においても, この取り扱いは行なわれるからである. このような領域をも含めて取り扱うために, §4の A と S の定義をすこし修正し,

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}W(\boldsymbol{r})\right) \tag{32}$$

$$W(\boldsymbol{r}) = S(\boldsymbol{r}) + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}T(\boldsymbol{r}) \tag{33}$$

$$A(\boldsymbol{r}) = \exp\left(T(\boldsymbol{r})\right) \tag{34}$$

と置く必要がある. S と T は $\hbar$ の偶関数になるようにとるが, これによって A と S が一通りに定まる. この新しい定義によると, A と S はもはや必ずしも実ではないけれども, 方程式 (17), (18) と方程式 (22), (23) はやはり成り立つ. WKB 近似は, $W(\boldsymbol{r})$ を $\hbar$ のべきによって展開し, シュレーディンガー方程式に入れて $\hbar^2$ より高位あるいは同位の項を無視することにある.

§7. 1次元における WKB 法

WKB 法が容易に適用されるのは1次元の問題だけである. それゆえわれわれは1次元の問題だけを取り扱い, 時間を含まないシュレーディンガー方程式（式 (22), (23)）の定常解を求めることにする. ここで述べる方法が場合によっては3次元のシュレーディンガー方程式を解くのに役立つこともありうる, というのはこの方程式を解くことも多くの場合, 角と動径の変数を分離することによって, 1次元波動方程式を解くことに帰着するからである（第9章を参照）.

---

(9) もっと詳しくは, R. E. Langer, *Phys. Rev.*, **51** (1937), 669; W. H. Furry, *Phys. Rev.*, **71** (1947), 360 を参照. また, P. Morse と H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York (1953)（好学社版リプリントあり), p. 1092 以降を参照.

$y(x)$ をシュレーディンガー方程式

$$y''+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\,y=0$$

を満たす波動関数とする.

$$y=\mathrm{e}^{\mathrm{i}w/\hbar},\qquad w=S+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\log A$$

(S と $\log A$ は $\hbar$ の偶関数) と置けば, 同値な方程式系

$$S'^2-2m(E-V)=\hbar^2\frac{A''}{A} \tag{35}$$

$$2A'S'+AS''=0 \tag{36}$$

を得る. 連続方程式 (36) を積分すると

$$A=\text{定数}\cdot(S')^{-\frac{1}{2}} \tag{37}$$

となる. この A の式を (35) に代入することにより, 方程式

$$S'^2=2m(E-V)+\hbar^2\left[\frac{3}{4}\left(\frac{S''}{S'}\right)^2-\frac{1}{2}\frac{S'''}{S'}\right] \tag{38}$$

が得られる. この S に関する3階微分方程式は, われわれの出発点であったシュレーディンガー方程式と厳密に同値である.

WKB 近似によれば, S を $\hbar^2$ のべき級数

$$S=S_0+\hbar^2S_1+\cdots\cdots \tag{39}$$

に展開し, この展開を方程式 (38) に入れ, 位数0の項だけを残す.

$$S'^2\simeq S_0'^2=2m(E-V(x)). \tag{40}$$

この近似方程式は容易に積分される.

$E\gtrless V(x)$ にしたがって二つの場合に分ける.

第一の場合: $E>V(x)$.

波長を

$$\lambda\!\!\!^{-}(x)=\frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V(x))}} \tag{41}$$

によって定義する. 方程式 (40) は $S'\simeq\pm\hbar/\lambda\!\!\!^{-}$ のときに満たされる. WKB 解は振動関数

$$y(x)=\alpha\sqrt{\lambda\!\!\!^{-}}\cos\left(\int^x\frac{\mathrm{d}x}{\lambda\!\!\!^{-}}+\varphi\right) \tag{42}$$

(α と φ は任意定数) の線形結合である.

第二の場合: $E<V(x)$ (古典粒子に対する禁止領域).

$$l(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V(x)-E)}}. \tag{43}$$

方程式 (40) は $S' \simeq \pm \mathrm{i}\hbar/l$ のときに満たされる．WKB 解は実の指数関数

$$y(x) = \sqrt{l}\left[\gamma \exp\left(+\int^x \frac{\mathrm{d}x}{l}\right) + \delta \exp\left(-\int^x \frac{\mathrm{d}x}{l}\right)\right] \tag{44}$$

の線形結合である．

§8. WKB 近似が成り立つための条件

WKB 近似の理論は複雑である．ここでは証明をつけずに，$\hbar^2$ のべきによる展開 (39) は一般に収束しないけれども，漸近展開になっていることを指摘するだけにとどめる．漸近展開というのは，有限個の項で止めたとき，$\hbar$ を十分小さくすれば S の値をよい近似で与えるものである．

WKB 近似が成り立つための判定法を求めるには，展開 (39) の第 2 項 $\hbar^2 S_1$ を計算すればよい．$\hbar^2$ の位数の補正は，WKB 解に因数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar S_1}$ を掛けることになる．$\hbar S_1 \ll 1$ のときその効果は無視できる．

展開 (39) を方程式 (38) に代入し $\hbar^2$ の項を等しいと置けば，S_1 についての微分方程式

$$2S_0' S_1' = \frac{[(S_0')^{-\frac{1}{2}}]''}{(S_0')^{-\frac{1}{2}}} \equiv \frac{3}{4}\left(\frac{S_0''}{S_0'}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{S_0'''}{S_0'}$$

を得る．$E > V$ のときは，$S_0' = \pm \hbar/\lambda\!\!\!^{-}$．これを入れて計算すれば

$$\hbar S_1' = \pm \frac{1}{2}\sqrt{\lambda\!\!\!^{-}}(\sqrt{\lambda\!\!\!^{-}})'' = \pm\left(\frac{1}{4}\lambda\!\!\!^{-}{}'' - \frac{1}{8}\frac{\lambda\!\!\!^{-}{}'^2}{\lambda\!\!\!^{-}}\right).$$

これから

$$\hbar S_1 = \pm\left(\frac{1}{4}\lambda\!\!\!^{-}{}' - \frac{1}{8}\int^x \frac{\lambda\!\!\!^{-}{}'^2}{\lambda\!\!\!^{-}}\,\mathrm{d}x\right) \tag{45}$$

が出る．$E < V$ のときは，$\lambda\!\!\!^{-}(x)$ を $l(x)$ に変えるだけで同じ式が得られる．

$$\begin{aligned} E > V(x) \quad & \text{のときは} \quad \lambda\!\!\!^{-}{}'(x) \ll 1 \\ E < V(x) \quad & \text{のときは} \quad l'(x) \ll 1 \end{aligned} \tag{46}$$

ならば，条件 $\hbar S_1 \ll 1$ が確かに満たされる．判定法 (46) は，一般に古典近似が成り立つための条件 (26) に比較されよう．

この判定法はまた，ポテンシャル $V(x)$ とその第 1 階導関数を含む不等式によってつぎのように表わされる．

$$\frac{|m\hbar V'|}{|2m(E-V)|^{3/2}} \ll 1. \tag{47}$$

§9. 限界点と接続公式

WKB 近似が利用されるときにはたいていの場合，

$$E = V(x)$$

となるような点の近くを除けば，条件 (47) が満たされる．これは古典運動の限界点，すなわち粒子の速度が0になり符号を変える点 (turning points : 回帰点) である．

数学的に見れば，WKB 近似はシュレーディンガー方程式

$$y'' + \frac{y}{\lambda\!\!\!^{-2}} = 0$$

を方程式

$$y'' + \left(\frac{1}{\lambda\!\!\!^{-2}} - \frac{(\sqrt{\lambda\!\!\!^{-}})''}{\sqrt{\lambda\!\!\!^{-}}}\right) y = 0 \tag{48}$$

に置き換えるものである（このことは領域 $E>V$ にも領域 $E<V$ にも適用され，あとの領域では $\lambda\!\!\!^{-} = il$）．事実，容易に確かめられるように，(42) と (44) は確かに方程式 (48) の一般解を表わす．この方程式は，波長が無限大になる点，すなわち各限界点 a において特異点——$(x-a)^{-2}$ の特異性——をもつ．これらの点の近くでは，シュレーディンガー方程式を方程式 (48) に変えることは確かに正しくない．それゆえ，完全な解を得るには，限界点のまわりの適当な大きさの領域においてシュレーディンガー方程式を解き，WKB 近似が成り立つ隣接領域で波動関数を表わす解 (42) または (44) に，その解を接続しなければならない．

実際には，限界点の領域における解の具体的な形を知ることにはほとんど意味がなく，この点の両側の WKB 解に接続することさえできればよい．この接続の問題はむずかしい数学的問題であり，その詳細についてはレインジャーの論文(9)に明快な解説がある．レインジャーの提出した解法は，シュレーディンガー方程式を，方程式 (48) ではなくて別の方程式に置き換えるものであり，この方程式は限界点において特異点をもたず，両側から (48) に漸近収束するものである．この方程式の一般解はこの点の両側で解 (42)， または解 (44) の一つに漸近的に収束する．ここでは，限界点をはさんで指数的な WKB 解と振動的なWKB 解とを結ぶ接続の公式をあげるだけにしよう．

考えを具体的にするために，$x \gtreqless a$ にしたがって $E \gtreqless V$ とする（左の障壁）．一般解は二つの解 y_1 と y_2 の線形結合であり，その漸近的な形はつぎのとおりである：

$$x \ll a \qquad\qquad x \gg a$$

$$y_1 \sim \sqrt{l}\,\exp\left(+\int_x^a \frac{\mathrm{d}x}{l}\right), \qquad y_1 \sim -\lambda^{\frac{1}{2}} \sin\left(\int_a^x \frac{\mathrm{d}x}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right), \tag{49}$$

$$y_2 \sim \frac{\sqrt{l}}{2}\exp\left(-\int_x^a \frac{\mathrm{d}x}{l}\right), \qquad y_2 \sim \lambda^{\frac{1}{2}} \cos\left(\int_a^x \frac{\mathrm{d}x}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{50}$$

便宜上，与えられた区間 $(x_1,\ x_2)$ に含まれる《波長の数》を，限界点の右にあるか左にあるかにしたがって，$(1/2\pi)\int_{x_1}^{x_2}(\mathrm{d}x/\lambda)$ または $(1/2\pi)\int_{x_1}^{x_2}(\mathrm{d}x/l)$ によって定義する．これらの接続の式が成り立つための条件はつぎのとおりである：

i) 限界点において運動エネルギー $E-V$ は $(x-a)$ のように0に近づき両側に少なくとも1《波長》，できれば数《波長》の幅をもつ領域内では，良い近似で $(x-a)$ に比例する．

ii) これらの《限界領域》はいずれも，その限界点の両側において数《波長》の幅をもつ《漸近領域》につながり，ここでは本来の WKB 近似が成り立つ．

公式 (49) と (50) を用いる際には注意を要する．解 Ay_1+By_2 は，$A=0$ となるきわめて特殊な場合を除き，領域 $x \ll a$ において漸近的には Ay_1 と同じ形になるということから困難が生じる．《指数的に増加する》項 Ay_1 は，A が B にくらべてどんなに小さくても厳密に0でない限り，《指数的に減少する》項 By_2 をいつでも凌駕する．その結果，漸近式が与えられても，それが《指数的に減少する》型（y_2 の型）でない限り，解を決定することができない．逆に，係数 A と B が近似的にしか知られず，しかも $|A| \ll |B|$ のときには，漸近式を近似的に決定することさえ不可能である．

そこで，この漸近領域 $(x \ll a)$ における WKB 解は知られているとし，それに接続する WKB 振動解を決定したいとする．このことができるのは，上記の解が《指数的に減少する》型 $(1/2)Bl^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\int_x^a(\mathrm{d}x/l)\right)$ のときだけである．この場合，解は回帰点の領域で確かに By_2 という形をとり，領域 $x \gg a$ におけるその挙動は公式 (50) によって与えられる．この結果は

$$\frac{1}{2}\sqrt{l}\,\exp\left(-\int_x^a \frac{\mathrm{d}x}{l}\right) \longrightarrow \sqrt{\lambda}\,\cos\left(\int_a^x \frac{\mathrm{d}x}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{51}$$

と書かれ，矢印は接続の行なわれる向きを示す．

逆に，《振動領域》$(x \gg a)$ において WKB 解が与えられているとしよう．この解は (42) すなわち

$$C\sqrt{\lambda}\,\cos\left(\int_a^x \frac{\mathrm{d}x}{\lambda} - \frac{\pi}{4} + \varphi\right)$$

（C と φ は複素定数）という形をしている．公式（49），（50）によれば，これは

$$A \simeq C\sin\varphi, \qquad B \simeq C\cos\varphi$$

によって定められる解の漸近式である．ここで気をつけなければならないのは，定数 A と B は前記の漸近式から近似的にしか定められないということである．このことから，$|\tan\varphi| \ll 1$ のときには，領域 $x \ll a$ におけるこの解の漸近式を決めることはまったく不可能である．そうでない場合には，公式（49）が漸近式を与える．この結果は

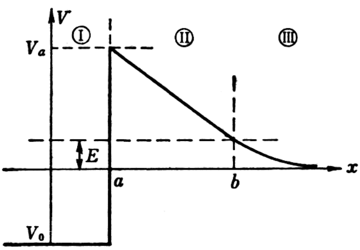
$$\sqrt{\lambda}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda}-\frac{\pi}{4}+\varphi\right) \longrightarrow \sin\varphi\sqrt{l}\exp\left(\int_x^a \frac{dx}{l}\right) \tag{52}$$

と書かれ，矢印は接続の行なわれる向きを示す．

右の障壁の場合，すなわち $a \gtrless x$ にしたがって $E \gtrless V$ となる場合にも，接続公式（51）と（52）は，不等式と積分の端点にある x と a とを入れ替えるだけでそのまま成り立つ．特に，矢印の向きはもとのままでなければならない．

§10. ポテンシャル障壁の透過

事柄を具体化するために，WKB 法を応用して，6・3 図に示されたポテンシャル障壁における透過係数を計算してみよう．領域 $x<a$（領域Ⅰ）では，$V(x)=V_0=$ 定数；$x>a$ のとき，$V(x)$ は正の値 $V_a=V(a)$ から $V(\infty)=0$ まで単調に減少する正の関数とする．



6・3 図　ポテンシャル障壁 $V(x)$.

粒子のエネルギーを E とし，x 軸上の点 b（$>a$）において $E=V(b)$ とする．不連続点 a と限界点 b とで x 軸が三つの領域Ⅰ，Ⅱ，Ⅲに分けられる．領域ⅡとⅢにおいてWKB法が適用できるものとする．

透過係数を求めるためには，シュレーディンガー方程式の解で，領域Ⅲにおける漸近式が純粋に透過波となるもの（x の増加する方向に伝わるもの）をつくる必要がある．この領域において，WKB 解は（42）の形をとる．その漸近式に課せられた条件により，この解は（定数を除いて）定まり，

$$y_{\text{III}} = \sqrt{\lambda}\exp\left(i\int_b^x \frac{dx}{\lambda}-i\frac{\pi}{4}\right) \qquad (x \gg b)$$

（位相 $\pi/4$ をつけ加えたのはあとの計算を簡単にするためである）となり，これはまた

$$y_{\text{III}} = \sqrt{\lambda}\left(\cos\left(\int_b^x \frac{dx}{\lambda}-\frac{\pi}{4}\right)+i\sin\left(\int_b^x \frac{dx}{\lambda}-\frac{\pi}{4}\right)\right).$$

接続公式 (49), (50) によれば，この解はつぎの解によって領域IIに延長される：

$$y_{\mathrm{II}} = -\mathrm{i}\sqrt{l}\exp\left(\int_x^b \frac{\mathrm{d}x}{l}\right) = -\mathrm{i}\sqrt{l}\,\mathrm{e}^{\tau}\exp\left(-\int_a^x \frac{\mathrm{d}x}{l}\right)$$

$$(a < x \ll b).$$

ただし，この式において

$$\tau = \int_a^b \frac{\mathrm{d}x}{l} = \int_a^b \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar}\,\mathrm{d}x$$

である．ここで

$$l_a = l(a) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_a - E)}}, \qquad k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

と置く．領域Iでは，シュレーディンガー方程式の解は（まったく厳密に）

$$y_{\mathrm{I}} = A\sin(k(x-a)+\delta)$$

という形である．定数 A と δ は，波動関数とその対数導関数が点 a において連続であるという条件から定まる．すなわち

$$k\cot\delta = -\frac{1}{l_a}, \qquad A\sin\delta = -\mathrm{i}\sqrt{l_a}\,\mathrm{e}^{\tau}. \tag{53}$$

y_{I} は入射波と反射波の和である．δ は実であるから，入射波 $-\mathrm{i}A\exp[\mathrm{i}(k(x-a)+\delta)]/2$ の流束は $(1/4)|A|^2\hbar k/m$ に等しい．(53) により，

$$\frac{k|A|^2}{4} = \frac{kl_a}{4}\frac{\mathrm{e}^{2\tau}}{\sin^2\delta} = \frac{kl_a}{4}\mathrm{e}^{2\tau}(1+\cot^2\delta) = \mathrm{e}^{2\tau}\frac{1+k^2l_a^2}{4kl_a}.$$

透過波 y_{III} の流束は $\hbar/m$ に等しいから，透過係数は

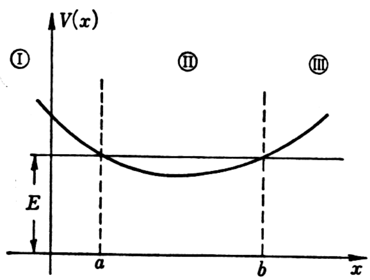
$$T = \frac{4kl_a}{1+k^2l_a^2}\mathrm{e}^{-2\tau} = 4\frac{\sqrt{(V_a-E)(E-V_0)}}{V_a-V_0}\mathrm{e}^{-2\tau}.$$

この計算法が正しいためには，WKB 近似が行なわれる領域IIとIIIにおいて，$V(x)$ が十分ゆるやかに変化し (条件(47))，限界点を囲む幅が数《波長》の領域において，$V(x)$ が x の線形関数により十分正確に表わされなければならない．このためには特に，障壁が少なくとも数《波長》の《厚み》をもつこと，それゆえ $\tau \gg 2\pi$，したがって T がきわめて小さい ($\lesssim 10^{-5}$) ことが要求される．

§ 11. 井戸型ポテンシャルのエネルギー準位

二番目の応用として，6・4 図の井戸型ポテンシャルを考え，とびとびのスペクトルのエネルギー準位を決定してみよう．

エネルギー E に対応して，古典運動の二つの限界点 a, b が定まる．これらによって x 軸が三つの領域I，II，IIIに分かれる．領域IとIIIで指数的に減少する WKB 解をつくっ



6·4 図　井戸型ポテンシャル $V(x)$.

てみると，

$$y_{\mathrm{I}} = \frac{1}{2} c \sqrt{l} \exp\left(-\int_x^a \frac{dx}{l}\right) \quad (x \ll a)$$

$$y_{\mathrm{III}} = \frac{1}{2} c' \sqrt{l} \exp\left(-\int_b^x \frac{dx}{l}\right) \quad (x \gg b)$$

(c と c' は調整できる定数). 接続公式 (50) と，右の障壁に対する類似の公式を使えば，これらの関数はそれぞれ領域Ⅱへつぎのように延長される：

$$y_a(x) = c\sqrt{\lambda} \cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right) \qquad (a \ll x \ll b)$$

$$y_b(x) = c'\sqrt{\lambda} \cos\left(\int_x^b \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right).$$

これらの関数が等しくなる，すなわち $y_a(x) = y_b(x) = y_{\mathrm{II}}$ となるのは，N を整数 ($\geqslant 0$) として，

$$I \equiv \int_a^b \frac{dx}{\lambda} \equiv \int_a^b \frac{\sqrt{2m(E-V(x))}}{\hbar} dx = \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi \tag{54}$$

となるときである．規則 (54) によって，とびとびのスペクトルのエネルギー準位が定まる．この際，$c' = (-)^N c$ である(*)．こうして，対応する固有関数を3領域のおのおのにおいて表わす式が（定数を除いて）得られる．ただし，限界点 a と b のまわりの二つの小区域は別である．

この方法が成り立つための条件により，点 a と b のまわりの小区域で $V(x)$ が x の関数としてほぼ線形であり，これらの小区域は数波長の幅をもつことが要求されるから，この方法があてはまるのはきわめて大きい量子数

$$N \gg 1$$

の場合だけである．

いくつかのごく恵まれた場合，たとえば調和振動子の場合などには，この方法により，基底状態まで含めてすべてのエネルギー準位の正確な値が与えられる (問題6を参照)．これは偶然とみなさなければならない．

量子化規則 (54) は定常波の条件と考えられる．区間 (a, b) は半波長を《半整数》(すなわち“1/2＋整数”) 個含まなければならない．実際上，これはボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則と同じものであり，異なるところは整の量子数の代りに《半整数》の量子

(*)［訳注］ $(-1)^N$ を略してこのように $(-)^N$ と記すことがある．

数が現われるだけである．定数 $2\hbar$ を別にすれば，積分 I は対応する古典位相空間の作用積分 $\oint p\,\mathrm{d}q$ にほかならない．これはまた一方では E より小さいエネルギーに対応する位相空間のひろがり $\omega(E)\equiv\iint_{H\leqslant E}\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q$ に等しい．それゆえ規則 (54) はつぎの形に表わされる：

$$\omega(E)\equiv\oint_{H=E}p\,\mathrm{d}q=\left(N+\frac{1}{2}\right)h. \tag{55}$$

(55) によれば，一つのエネルギー準位からすぐ上の準位に移るとき，位相空間におけるひろがりは h だけ増す．このことからエネルギー準位の分布に関してつぎの重要な結果が導き出される：

<u>h を単位として測れば，エネルギー帯 $(E, E+\delta E)$ に対応する位相空間の面積は，対応する量子系の束縛状態のうち，このエネルギー帯に入るものの個数に等しい．</u>

この結果が成り立つための条件は，WKB 法の条件よりも事実ゆるやかである．実際には，《量子数が大きくなる極限において》これはつねに成り立つ．ふつうは，次元数 R が 1 より大きい系に対しても，位相空間におけるひろがりの単位を h^R にとりさえすれば，上の結果は同様に適用されると仮定する――またごく簡単な場合には証明することもできる．

演習と問題

1.　調和振動子のハミルトニアンは $H=(p^2+m^2\omega^2q^2)/2m$ である．これからつぎのことを示せ．平均値 $\langle q\rangle$, $\langle p\rangle$ は原点のまわりに振動数 $\omega/2\pi$ の正弦振動を行なう．偏差の二乗 ϖ, χ (§3 の記号) も正弦振動を行なうが，周期は半分で，中心は正確に計算される一つの (正の) 平均値である．またどのような条件の下に ϖ と χ は定数となるか．

2.　電磁場内の荷電粒子を表わす波束の中心の運動は，つぎの二つの場合に，古典粒子の運動と厳密に同じであることを示せ：a) 一様な電場，b) 一様な磁場．

3.　一様な電場内の荷電粒子を表わす波束の《拡散》は，自由波束と同じ法則にしたがうことを示せ (ϖ = 定数，χ = 時刻の 2 次関数)．

4.　1 粒子の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に対して，関数

$$D(\boldsymbol{R},\boldsymbol{P})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}\right)\psi^*\left(\boldsymbol{R}-\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right)\psi\left(\boldsymbol{R}+\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

をつくり，これを (ウィーグナーにしたがって) 与えられた波動関数に伴う古典統計的混合の位相空間における密度と解釈する[10]．これに対してつぎのことを示せ：

---

[10] しかしながら，古典統計的混合の位相空間における密度とは違って，$D(\boldsymbol{R},\boldsymbol{P})$ は負の値をとりうる．

i）この混合の位置と運動量の分布は，状態 $\psi(\boldsymbol{r})$ における量子的粒子の分布と同じである：

$$\int D(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P})\,\mathrm{d}\boldsymbol{P} = |\psi(\boldsymbol{R})|^2, \qquad \int D(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P})\,\mathrm{d}\boldsymbol{R} = |\varphi(\boldsymbol{P})|^2$$

（$\varphi(\boldsymbol{P})$ は運動量空間の波動関数）．

ii）自由粒子の場合，混合の時間的変化は，同じ質量をもつ古典自由粒子の統計的混合の変化と厳密に同じである．

iii）自由波束の《拡散》の法則がふたたび見いだされる．

5. 質量 m，エネルギー E をもつ粒子がポテンシャル障壁 $V(x)$ を横ぎるときの透過係数 T を WKB 法によって計算してみる．$V(x)$ はゆるやかに変わり，区間（$-\infty$, $+\infty$）の両端では E より小さい極限に近づき，限界点は a と b の二つしかないとする．

$$T = \exp\left(-2\int_a^b \frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar}\,\mathrm{d}x\right)$$

であることを示せ．

6. 調和振動子（問題1のハミルトニアン）のエネルギー準位を WKB 法によって計算せよ．この方法が成り立つ条件を論ぜよ．

第7章　量子論の形式的一般論

A. 数学的な枠組

§1. 重ね合わせの原理とベクトルによる力学的状態の表現

第4章と第5章で展開した波動力学の解釈は，いずれも関数 Ψ と Φ によって位置と運動量の確率密度を定めることから出発している．ここに Ψ と Φ はそれぞれ配置空間と運動量空間に関する波動関数である．これら二つの関数がこの理論のなかで演じる対称的な役割については，すでに明らかにしたとおりである．平行な議論は最後まで推し進められる．実際，平均値に関する基本的な要請（第5章，§3）は運動量空間における演算によって言い表わすこともできる．それぞれ $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ および $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{p})$ の形をした関数の平均値を表わす式（第4章 (13) および (20)）はすでに一般化された．これらの式に対応し，関数 Φ によって表わされた式（第4章 (21) および (14)）についても，同じ一般化がまったく同様にうまく行なわれる．第5章§3の要請 a)，b) は同値なつぎの要請に置き換えられる．

a′)　任意の力学変数 $\mathcal{A} = A(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)$ に線形演算子

$$A\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_1}, \cdots, \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_R}; p_1, \cdots, p_R\right)$$

が対応づけられる．

b′)　系が関数 $\Phi(p_1, \cdots, p_R)$ によって定められる力学的状態にあるとき，この力学変数のとる値の平均値は

$$\langle A\rangle = \frac{\langle\Phi, A\Phi\rangle}{\langle\Phi, \Phi\rangle}$$

であり，この右辺の括弧は運動量空間における内積である：

$$\langle\Phi, A\Phi\rangle = \int\cdots\int\Phi^*(A\Phi)\,\mathrm{d}p_1\cdots\mathrm{d}p_R, \qquad \langle\Phi, \Phi\rangle = \int\cdots\int\Phi^*\Phi\,\mathrm{d}p_1\cdots\mathrm{d}p_R.$$

要請 a), b) と要請 a′), b′) とが同値であることは，フーリエ変換の性質に基づく（付録Aを参照）．この同値性の証明はむずかしくないがここではそれに立ち入らない．

関数 Φ と Ψ が同じ力学的状態の同値な表現であるのと同様に，オブザーバブル

$$A\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_1}, \cdots, \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_R}; p_1, \cdots, p_R\right) \qquad と \qquad A\left(q_1, \cdots, q_R; \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q_R}\right)$$

も同じ力学変数の同値な表現である（第4章§5の終りの注意を参照）．オブザーバブルの全理論はこれら二つの表現のうちどちらを使っても同じように展開される．こうして量子力学については二つの同値な定式化が得られる．

もしも波動関数 Φ と Ψ が無限次元空間の同じベクトルを表現すると考えれば，これらのことはすべて明瞭になる．第5章において導入されたすべての概念，つまり関数空間，内積，ノルム，直交性などは，こうすることによりきわめて簡単な幾何学的意味をもつ．このように考えると，配置空間の各点で関数 $\Psi(q_1, \cdots, q_R)$ がとる値は，ある直交軸の系に関するこのベクトルの成分である．同様に，運動量空間の各点で関数 $\Phi(p_1, \cdots, p_R)$ がとる値は，別の軸系に関する同じベクトルの成分である．またさらに，与えられた完全直交規格化系の固有関数列による Ψ の展開（第5章 (14)）における係数 $c_p^{(\tau)}$ は，第三の軸系に関するこのベクトルの成分である．

こうしてわれわれは，直接にベクトルの概念から出発し，それについてなされる個々の表現を用いないで，量子論をすっかりつくり上げるという考えに到達した．このような定式化の立場で，この理論の基本原理として，力学的状態の重ね合わせの原理を設定する．これによれば，与えられた量子系のとりうる力学的状態は，一般にすべての波動に特有の性質として，線形に重ね合わされるという性質をもち，その結果，のちに詳しく述べるようなある線形空間のベクトルによって表わされる．したがって，各力学的状態にはこの抽象的空間のベクトルが一つ対応する．また，各力学変数にはこの空間の線形演算子が一つ対応する．このように言い表わすと，この理論は形の上で波動力学より簡明にまたエレガントになる．それはまた，より一般的になる，というのは，古典的な類似をもたない量子系にも適用されるからである．

これから説明するのは，このような量子論の一般的な定式化である．われわれは大筋においてディラックの説明にしたがい，彼がこのために導入した特に便利な記号を利用する(1)．本章は理論の数学的枠組をつくる線形代数 (2) の諸概念にあてられる．この形式論による物理現象の記述は第8章の主題になっている．

I．ベクトルと演算子

§2．ベクトル空間．ケットベクトル

§1の仮定に基づいて，われわれは個々の力学的状態にある型のベクトルを結びつけ，

---

(1) P. A. M. Dirac, 前掲書（第2章の注(8)（39頁）参照）．

(2) この問題についての厳密で完全な説明は，A. Lichnerowicz および M. H. Stone の前掲書（第5章の注(3)(139頁）参照）に見られる．

それをディラックにしたがって**ケットベクトル**あるいは**ケット**と呼び，記号 $|\ \rangle$ で表わす．ケットを互いに区別するためには，各記号のなかに特殊な文字や，一つあるいはいくつかの文字を入れたりして，この記号を補う．文字は場合によりとびとびの数を表わしたり，連続的な変数を表わしたりする．たとえばケット u は記号 $|u\rangle$ で表わされる．

ケットの全体は線形ベクトル空間をつくる．いくつかのケットベクトルの線形結合はまたケットベクトルである．たとえば二つのケットを $|1\rangle$, $|2\rangle$ とし，二つの複素数を λ_1, λ_2 とすれば，線形結合

$$|v\rangle=\lambda_1|1\rangle+\lambda_2|2\rangle \tag{1}$$

はケット空間のベクトルである．

同じように，連続的な変数 ξ によって $|\xi\rangle$ が決まるとき，ξ の任意の複素関数を $\lambda(\xi)$ とすれば，積分

$$|w\rangle=\int_{\xi_1}^{\xi_2}\lambda(\xi)|\xi\rangle d\xi \tag{2}$$

はケット空間のベクトルである．言葉使いの明白な拡張として，$|w\rangle$ はケット $|\xi\rangle$ の線形結合（あるいは線形重ね合わせ）であるという．

ケットの集合が与えられたとき，そのうちのどれをとっても他のケットの線形結合の形に表わされないならば，これらのケットは線形独立であると定義する（この線形結合は（1）の型でも（2）の型あるいは混合型でもよい）．

ベクトル空間に含まれる線形独立なベクトルが最大限 n 個あるとき，これは有限次元の空間であり，次元数は n に等しいと定義する．この空間から線形独立な n 個のベクトルを一組選ぶと，他のすべてのベクトルはこれらの特別な n 個のベクトルの線形結合に等しい．

考えているベクトル空間の線形独立なベクトルの個数に制限がないとき，この空間は無限の次元をもつ．これはヒルベルト空間の場合であり，すでに見たように，これはまた，波動力学の波動関数の場合でもある．それにもかかわらず，線形独立な（可算または非可算無限個の）ベクトルの列を適当に選んで，この空間の任意のベクトルをこれらの《基底ベクトル》の線形結合（ときには無限級数あるいは積分）に等しくすることがいつでもできる．

ケットベクトルの空間 $\mathcal{E}$ が与えられたとき，この空間に属するケットベクトルの列を考えよう．この列のケットと，これらのケットの線形結合の全体から成る集合は一つのベクトル空間 $\mathcal{E}'$ をつくる．$\mathcal{E}'$ はこの列のケットによって張られた空間であると定義する．

$\mathcal{E}'$ のケットはすべて $\mathcal{E}$ に含まれる：$\mathcal{E}'$ は $\mathcal{E}$ の部分空間であるという．空間 $\mathcal{E}$ が有限次元 n をもつならば，$\mathcal{E}'$ の次元数は確かに有限であり，n よりも小さい．$\mathcal{E}$ が無限次元であるときは，$\mathcal{E}'$ の次元数について何の制限もない．

§3. 双対空間．ブラベクトル

線形代数学においてよく知られているように(2)，各ベクトル空間には一つの双対空間が結びつけられる．実際，ケット $|u\rangle$ の任意の線形関数 $\chi(|u\rangle)$ は，ベクトルの特徴である重ね合わせの性質をもち(3)，その結果として別の型のベクトルを定める．このベクトルをディラックにしたがって**ブラベクトル**または**ブラ**と呼び，記号 $\langle\ |$ で表わす．たとえば，関数 $\chi(|u\rangle)$ はブラ $\langle\chi|$ を定める；個々のケット $|u\rangle$ に対してこの関数がとる値は一つの数（一般に複素数）であり，これを記号 $\langle\chi|u\rangle$ で表わす．

任意の $|u\rangle$ に対して関数値 $\Phi(|u\rangle)$ が0であるとき，ブラ $\langle\Phi|$ は0であると定義する：

$$\text{任意の } |u\rangle \text{ に対し } \langle\Phi|u\rangle=0 \text{ のとき，} \langle\Phi|=0. \tag{3}$$

同様に，

$$\text{任意の } |u\rangle \text{ に対し } \langle\Phi_1|u\rangle=\langle\Phi_2|u\rangle \text{ のとき，} \langle\Phi_1|=\langle\Phi_2|.$$

すなわち二つのブラは等しい．

ケット空間が有限の次元数をもつならば，双対空間も同じ次元数をもつ．ケット空間の次元数が無限であるときは，双対空間も同じ性質をもつ．

上に定義したベクトル空間に計量を入れるために，この空間のベクトルと双対空間のベクトルとのあいだに一対一の対応が存在するという仮定を設ける．この一対一の対応によって結びつけられたブラとケットは互いに共役であると言い，同じ文字（または同じ変数値）によって目じるしがつけられる．たとえばケット $|u\rangle$ に共役なブラは記号 $\langle u|$ で表わされる．

さらに，この対応は反線形であると仮定する(*)．言いかえれば，ケット

$$|v\rangle=\lambda_1|1\rangle+\lambda_2|2\rangle \tag{4}$$

に共役なブラは

---

(3) ケット $|u\rangle$ の線形関数であるという χ の性質は，$\chi(\lambda_1|1\rangle+\lambda_2|2\rangle)=\lambda_1\chi(|1\rangle)+\lambda_2\chi(|2\rangle)$ を意味する．二つの関数 χ_1，χ_2 がこの性質をもつ場合には，これら二つの関数の線形結合 $\mu_1\chi_1+\mu_2\chi_2$ もまたつねにこの性質をもつことは明らかである．

(*) ［訳注］ antilinéaire というあまり使われない語が用いてあるので，一応“反線形”と訳しておくことにした．

$$\langle v| = \lambda_1^*\langle 1| + \lambda_2^*\langle 2| \quad (5)$$

である．同様に，ケット

$$|w\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda(\xi)|\xi\rangle d\xi \quad (6)$$

に共役なブラは

$$\langle w| = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda^*(\xi)\langle \xi| d\xi. \quad (7)$$

このように，ケットとブラとの対応は波動力学における波動関数とその複素共役との対応に似ている．ついでながら，ケットが0ならばそれに共役なブラも0であり，逆も成り立つことに注意する．

空間 $\mathcal{E}$ の部分空間 $\mathcal{E}'$ のケットに共役なブラの全体は，$\mathcal{E}'$ に双対な部分空間をつくる．

§4. 内　　積

ケット $|v\rangle$ とケット $|u\rangle$ との**内積**は，数（一般には複素数）$\langle v|u\rangle$ つまり，$|v\rangle$ に共役なブラに結びついた線形関数のとる値 $v(|u\rangle)$ であると定義する．

この定義からすぐに得られる結果として，内積 $\langle v|u\rangle$ は $|u\rangle$ に関して線形であり，$|v\rangle$ に関して反線形である．

内積はこの他にも，波動力学における波動関数の内積に特有な諸性質（第5章，§2）をすべてもっていると仮定する．すなわち

1°　$|u\rangle$ と $|v\rangle$ との内積は，$|v\rangle$ と $|u\rangle$ との内積の複素共役である．

$$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*. \quad (8)$$

2°　任意のベクトル u は，実で非負のノルム $N_u \equiv \langle u|u\rangle$ をもつ．

$$\langle u|u\rangle \geqslant 0. \quad (9)$$

これは u が0のときに限って0になる．

これらの性質からシュワルツの不等式が出てくる．すなわち任意の $|u\rangle$ と $|v\rangle$ に対して

$$|\langle u|v\rangle|^2 \leqslant \langle u|u\rangle\langle v|v\rangle. \quad (10)$$

等号が成り立つのは，ベクトル $|u\rangle$ と $|v\rangle$ が共線のとき（すなわち比例するとき）に限る．

上記の公理のほかに，ケットベクトルの空間 $\mathcal{E}$ が（双対空間であるブラ空間とともに）完全かつ可分である（第5章 §2を参照）という仮定を補わなければならない．すなわち，$\mathcal{E}$ はヒルベルト空間である．

二つのベクトルはその内積が0のとき，直交すると定義する．$\mathcal{E}$ の二つの部分空間 $\mathcal{E}_1$, $\mathcal{E}_2$ が直交するというのは，一方に属する任意のベクトルと他方に属する任意のベクトルが直交するときである．明らかに，$\mathcal{E}_1$ と $\mathcal{E}_2$ とは〔零ベクトルを除いて〕共通なベクトルをもたない．実際，$\mathcal{E}_1$ と $\mathcal{E}_2$ に共通なベクトルはすべてそれ自体に直交するから，そのノルムは0であり，したがって零ベクトルでなければならない．

$\mathcal{E}_1$ に直交するベクトルの全体は，$\mathcal{E}_1$ に直交する一つの部分空間 $\mathcal{E}_1^{\times}$ すなわち $\mathcal{E}_1$ の補空間をつくる．部分空間 $\mathcal{E}_1$ が空間 $\mathcal{E}$ そのものと一致するときには，$\mathcal{E}_1^{\times}$ は0に縮まる．$\mathcal{E}$ の任意のベクトルは，$\mathcal{E}_1$ のなかにあるベクトルと，その補空間のなかにあるベクトルとの和として書き表わされ，その表わし方はただ一通りしかないことが証明される(2)：

$$|u\rangle=|u_1\rangle+|u_1^{\times}\rangle.$$

$|u_1\rangle$ は部分空間 $\mathcal{E}_1$ への，$|u\rangle$ の射影であると定義する．この射影という概念については，第II節においてまた詳しく論じる機会があろう．

内積に関して考えるときにはいつでも，(ケットまたはブラ)ベクトルは有限なノルムをもつことが暗黙のうちに仮定されている．そうでないと，ベクトルのノルムに関する公理がまったく意味をもたなくなる．この了解の下に，考えられているケットベクトルの空間 $\mathcal{E}$ はヒルベルト空間である．第5章で見たように，力学的状態を表わしうるベクトルは実際には有限なノルムをもたなければならないが，固有値問題において連続スペクトルを扱う際に，無限大の長さをもつ固有ベクトルの導入が要求される．それゆえ，われわれの空間のなかには，(少なくとも)一つの連続変数に依存するノルム無限大のベクトル $|\xi\rangle$ をも取り入れ，この種のベクトルに内積の概念をひろげなければならない．

$|\xi\rangle$ はノルム有限な任意のベクトル $|u\rangle$ と有限な内積

$$\langle u|\xi\rangle$$

をつくり，この内積は $|\xi\rangle$ に関して線形，$|u\rangle$ に関して反線形であると仮定する．同じように，内積 $\langle\xi|u\rangle$ を定め，公理として

$$\langle\xi|u\rangle=\langle u|\xi\rangle^*$$

と置く．一方，$|\xi\rangle$ 型の二つのベクトルの内積は収束しなくてもよい．特に，$|\xi\rangle$ のノルムは無限大である．しかし固有微分

$$|\xi,\delta\xi\rangle\equiv(\delta\xi)^{-\frac{1}{2}}\int_{\xi}^{\xi+\delta\xi}|\xi'\rangle\,\mathrm{d}\xi' \qquad (11)$$

は正の決まったノルムをもち，そのノルムは $\delta\xi\to 0$ のとき有限な極限に近づくと仮定する．

厳密には，ベクトル $|\xi\rangle$ は空間 $\mathcal{E}$ に属さない．しかしその固有微分と，もっと一般に

（2）の型の線形結合は $\mathcal{E}$ に属し，ヒルベルト空間のベクトルに関する公理をすべて満たす．

§5. 線形演算子

こうしてケットベクトルの空間が定められたから，この空間に線形演算子を定義することができる（第2章 §11を参照）．

このベクトル空間の各ケット $|u\rangle$ に，あるケット $|v\rangle$ が対応すると考える．このとき，ケット $|u\rangle$ にある演算子が作用した結果として $|v\rangle$ が生じるという．さらにこの対応が線形であるとき，このように定められた演算子はある線形演算子 A である．これを

$$|v\rangle = A|u\rangle$$

と書く．任意の $|u\rangle$ に対してケット $|v\rangle$ が0ならばこの演算子は0である．

演算子 A が0であるためには，任意の $|u\rangle$ に対して

$$\langle u|A|u\rangle = 0$$

となることが必要十分である．

この性質を証明するのに大した困難はないから，ここでは述べないでおこう．これからすぐにつぎのことが導かれる．

二つの演算子 A と B が等しいためには，任意の $|u\rangle$ に対して，

$$\langle u|A|u\rangle = \langle u|B|u\rangle \tag{12}$$

となることが必要十分である．

演算子に関する主な代数演算——定数を掛けること，和および積——はすでに定義してある（第2章，§11）．線形演算子の和は，結合および交換法則を満たす演算である．積は結合法則と，加法に関する分配法則を満たすけれども——線形演算子の代数とふつうの代数との根本的な相違点として——これは可換でない．二つの線形演算子の交換子が記号

$$[A, B] \equiv AB - BA$$

で表わされることを思い出そう．交換子の代数の主な性質については，第5章 §17で学んだ（第5章（63）—（66））．それらは全部そのまま成り立つから，ここで改めて述べない．

与えられた定数 c をケットに掛ける演算も，また一つの線形演算子を定めるということに注意する．この演算子 c は，どんな線形演算子ともつねに交換するという性質をもつ：$[A, c] = 0$.

特に，1を掛けることは《恒等》演算子である．

上に定義した $|u\rangle$ と $|v\rangle$ との対応が一対一であるとき，これによって二つの線形演算子 A と B が定められる：

$$|v\rangle = A|u\rangle, \qquad |u\rangle = B|v\rangle. \tag{13}$$

これらの演算子は互いに逆であると定義する．また，二つの演算子 A と B が等式

$$AB = 1, \qquad BA = 1 \tag{14}$$

を同時に満たすとき，互いに逆であるともいう．これら二つの定義は同値である．

与えられた演算子 A の逆がつねに存在するとは限らない．それが存在するときには，ふつう A^{-1} という記号で表わされる．定義式 (14) を使って，つぎの性質が容易に示される．

二つの演算子 P, Q がそれぞれ逆をもつならば，積 PQ も逆をもち，

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1} \tag{15}$$

が成り立つ ((15) の右辺で因数の順序が入れ替っていることに注意せよ)．

ケット空間における線形演算子 A の作用が知られたならば，双対ベクトル空間におけるその作用も，つぎのように一義的に定められる．演算子 A は線形であるから，一つのブラ $\langle\chi|$ を与えると内積 $\langle\chi|(A|u\rangle)$ は明らかに $|u\rangle$ の線形関数である．この関数によって定められるブラを $\langle\eta|$ とする． ブラ $\langle\chi|$ の一つ一つにブラ $\langle\eta|$ が対応する．この対応が線形であることは明らかである（内積の性質)．このとき，われわれは $\langle\chi|$ に Aの演算を施した結果として $\langle\eta|$ が生じたと言い，

$$\langle\eta| = \langle\chi|A \tag{16}$$

と書く．この定義により，内積のあいだの恒等式

$$(\langle\chi|A)|u\rangle \equiv \langle\chi|(A|u\rangle) \tag{17}$$

が得られる．それゆえ，これら二つの表現のなかの括弧は要らなくなり，これら二つの等しい内積を互いに区別せず表わすために，これからは $\langle\chi|A|u\rangle$ と書く．

恒等式 (17) を使って，ブラに作用する線形演算子の代数に関して種々の演算を定義することができる．特に，三つの基本演算としてつぎのものが得られる．

a) <u>複素定数 c を A に掛けること</u>

$$(cA)|u\rangle = c(A|u\rangle) \quad \text{から} \quad \langle\chi|(cA) = c(\langle\chi|A)$$

b) 演算子の<u>和</u> $S = A+B$

$$S|u\rangle = A|u\rangle + B|u\rangle \quad \text{から} \quad \langle\chi|S = \langle\chi|A + \langle\chi|B$$

c) 演算子の<u>積</u> $P = AB$

$$P|u\rangle = A(B|u\rangle) \quad \text{から} \quad \langle\chi|P = (\langle\chi|A)B.$$

ブラを演算子の左に，ケットを右に置くという規約はつねに守られるが，線形演算子に関する代数計算は双方の場合に同じである．

先に述べたような記法を利用すると，ある種の演算子が特に取り扱いやすくなる．それ

は $|u\rangle\langle v|$ という型の演算子であり，任意のケット $|w\rangle$ に対してこれが作用した結果は，$|u\rangle$ に比例するケット $|u\rangle\langle v|w\rangle$（比例係数は $\langle v|w\rangle$）を生じ，また任意のブラ $\langle w|$ にこれが作用した結果は，$\langle v|$ に比例するブラ $\langle w|u\rangle\langle v|$ を生じるものである．演算子 $|u\rangle\langle v|$ は逆をもたない．

§6. 二つのベクトル空間のテンソル積[4]

このようなベクトル代数の導入を終るまえに，きわめて頻繁に利用される一つの演算，二つのベクトル空間のテンソル積を定義することが残っている．

この演算の目的や利点はつぎの例によって説明される．

2粒子の量子系を考えよう．粒子1に関する波動関数 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ と粒子2に関する波動関数 $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ との積 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ はこの系のごく特殊な力学的状態を表わす（第4章 §6）．最も一般的な波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ はこの形をしていないが，いつでもこの形の波動関数の線形結合として表わされる．そのためにはいろいろな方法があるが，その一つは $\boldsymbol{r}_1$ の完全直交規格化系に属する関数の級数として Ψ を展開することである．展開の係数は $\boldsymbol{r}_2$ の関数であるから，この級数の各項は確かに求める形をしている．それゆえ，系全体の波動関数の空間は，各部分系に関する波動関数 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ と $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ の積の線形結合によってつくられる．このとき，関数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ の空間は関数 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ の空間と関数 $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ の空間とのテンソル積であるという．

一方，積 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ は，系全体の研究において特別な役割を演じる．事実，粒子1の力学変数は，$\boldsymbol{r}_1$ の関数とみなした波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ に作用するオブザーバブル A_1 によって表わされ，粒子2のそれは，$\boldsymbol{r}_2$ の関数とみなした同じ関数に作用するオブザーバブル A_2 によって表わされる．明らかに，各オブザーバブル A_1 は各オブザーバブル A_2 と交換する．Ψ が $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ という形をしているときは，この型のオブザーバブルの作用がとりわけ簡単である．たとえば $A_1(\Psi_1\Psi_2)$ は $(A_1\Psi_1)$ と Ψ_2 との積に等しい．

上の注意はまったく一般的に，二つのいっそう簡単な系に分解できるような系に対してはいつでも適用される．

この章でくりひろげている抽象的な用語によれば，テンソル積はつぎのように定義される．二つのベクトル空間を $\mathcal{E}_1$, $\mathcal{E}_2$ とする．一方からケット $|u\rangle^{(1)}$ を，他方からケット $|u\rangle^{(2)}$ をとれば，積ケット $|u\rangle^{(1)}|u\rangle^{(2)}$ をつくることができる．この乗法は可換で，記号

(4) この型の積はしばしばクロネッカー積と呼ばれる．

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle \equiv |u\rangle^{(1)}|u\rangle^{(2)} \tag{18}$$

を用いて表わすことにする．さらに，これが加法に関して分配法則を満たすと仮定する．

$$|u\rangle^{(1)} = \lambda|v\rangle^{(1)}+\mu|w\rangle^{(1)}$$

のとき，

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = \lambda|v^{(1)}u^{(2)}\rangle+\mu|w^{(1)}u^{(2)}\rangle.$$

同様に，

$$|u\rangle^{(2)} = \lambda|v\rangle^{(2)}+\mu|w\rangle^{(2)}$$

のとき，

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = \lambda|u^{(1)}v^{(2)}\rangle+\mu|u^{(1)}w^{(2)}\rangle.$$

ケット $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ の全体は新らしいベクトル空間すなわち空間 $\mathcal{E}^{(1)}\otimes\mathcal{E}^{(2)}$ を張るが，これをベクトル空間 $\mathcal{E}^{(1)}$ と $\mathcal{E}^{(2)}$ のテンソル積と名づける．

もとの空間がそれぞれ N_1 および N_2 次元をもつならば，積空間の次元数は N_1N_2 である．しかしこの§6の初めに述べた例からわかるように，テンソル積は無限次元の空間に対してもそのまま行なわれる．

空間 $\mathcal{E}^{(1)}$ の各線形演算子 $A^{(1)}$ に積空間の線形演算子が一つ対応する．それを同じ記号で表わす．任意のケット $|u\rangle^{(1)}$ に対する $A^{(1)}$ の作用はわかっているから，それを

$$A^{(1)}|u\rangle^{(1)} = |v\rangle^{(1)}$$

とするとき，積空間の特殊なケット $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ に対するその作用を

$$A^{(1)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |v^{(1)}u^{(2)}\rangle \tag{19}$$

によって定める．これから積空間の一般のケットに対する作用は線形重ね合わせによって導かれる．同様に，空間 $\mathcal{E}^{(2)}$ の各線形演算子 $A^{(2)}$ によって積空間における線形演算子が一つ定められる．

すべての演算子 $A^{(1)}$ はすべての演算子 $A^{(2)}$ と交換する．

$$[A^{(1)}, A^{(2)}] = 0.$$

実際，演算子 $A^{(1)}$ と $A^{(2)}$ の定義そのものを利用して，積空間を張るベクトル $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ のおのおのに対する $[A^{(1)}, A^{(2)}]$ の作用は0になることが確かめられる：

$$A^{(1)}A^{(2)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |v^{(1)}v^{(2)}\rangle = A^{(2)}A^{(1)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle.$$

積空間におけるケットとブラの対応，ブラに対する線形演算子の作用等々も定義することができる．上に述べた代数の諸法則は，積空間におけるすべての代数演算に対してもそのまま成り立つ．これらの結果を証明するのにたいした困難はないから，ここでは述べない．

II. エルミート演算子，射影子およびオブザーバブル

§7. 随伴演算子と共役関係

共役なブラとケットとの一対一の対応から，線形演算子のあいだにも類似の共役関係をひき出すことができる．

A を線形演算子とする．ブラ $\langle u|A$ に共役なケットを $|v\rangle$ とする．$|v\rangle$ はブラ $\langle u|$ から反線形的に決まる．それゆえこれは $|u\rangle$ の線形関数である．この線形対応は一つの線形演算子を定めるが，これを A のエルミート共役演算子または A の随伴演算子と呼び，記号 $A^\dagger$ で表わす．

$$|v\rangle = A^\dagger|u\rangle.$$

$A=0$ のとき $A^\dagger=0$ で，逆も成り立つことは明らかである．

$A^\dagger|u\rangle$ はブラ $\langle u|A$ に共役なケットであるから，任意に与えられたブラ $\langle t|$ とこのケットとの内積は，$\langle u|A$ と $|t\rangle$ との内積の共役複素数である（性質(8)）．それゆえ，きわめて重要な共役関係

$$\langle t|A^\dagger|u\rangle = \langle u|A|t\rangle^* \tag{20}$$

が得られる．

この関係は任意の $|u\rangle$ と $|t\rangle$ に対して成り立つから，$\langle t|A^\dagger$ に共役なケットは必ず $A|t\rangle$ に等しい．したがって $A^\dagger$ のエルミート共役は演算子 A そのものであり，エルミート共役をとることは相反的な演算である．

$$(A^\dagger)^\dagger = A. \tag{21}$$

同様にしてつぎの基本的な関係が得られる．

$$(cA)^\dagger = c^* A^\dagger \tag{22}$$

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \tag{23}$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \tag{24}$$

積 AB の随伴の式 (24) において，演算子の順序が入れ替ることに十分注意せよ．さらに，演算子 $|u\rangle\langle v|$ の随伴は

$$(|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u| \tag{25}$$

である．

演算子におけるエルミート共役関係は，ベクトルにおけるブラとケットの共役関係と数における複素共役関係に相当するものである．これら共役の演算は，すべて形式論において重要な役割を演じる．ディラックの記法によると，どのような代数式が現われても，そ

の式に対してこれらを容易に実行することができる．つぎのごく簡単な規則にしたがえばよい：いたるところで数をその複素共役に，ブラを共役なケットに，ケットをブラに，演算子をそのエルミート共役に置き換え，各項に現われる種々の記号の順序，すなわちブラとケットと演算子の順序を逆にせよ．

この規則は性質 (20)，(24)，(25) の明瞭な一般化である．その適用例をいくつか示そう．演算子 $AB|u\rangle\langle v|C$ のエルミート共役は $C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger$；ケット $AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$ に共役なブラは $\langle w|C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger$；$\langle t|AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$ の複素共役は $\langle w|C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger|t\rangle$，以下同様である．

§8. エルミート（または自己随伴）演算子，正の定符号エルミート演算子，ユニタリ演算子

線形演算子 H がエルミートであると定義されるのは，H がそれ自体の随伴演算子になっているときである．すなわち

$$H = H^\dagger.$$

演算子 I が反エルミートといわれるのは，I の符号を変えるとその随伴演算子になるときである．

$$I = -I^\dagger.$$

これらの定義からつぎの性質が容易に導かれる．

任意の線形演算子は，エルミートと反エルミートの二つの演算子の和の形に表わされ，この表わし方は一通りしかない：

$$A = H_A + I_A. \tag{26}$$

そして

$$H_A = \frac{A+A^\dagger}{2}, \qquad I_A = \frac{A-A^\dagger}{2} \tag{27}$$

である．

実係数によるエルミート演算子の線形結合はすべてエルミートである．二つのエルミート演算子 H と K の積は必ずしもエルミートではない．なぜなら，(24) により

$$(HK)^\dagger = KH \tag{28}$$

となるからである．HK は H と K が交換するときだけエルミートである．さらに，交換子 $[H, K]$ は反エルミートであり，HK の分解 (26) は

$$HK = \frac{HK+KH}{2} + \frac{1}{2}[H, K] \tag{29}$$

と書かれる．

演算子 $|a\rangle\langle a|$ は一つのエルミート演算子である．二つの異なる(*)ケット $|a\rangle$ と $|b\rangle$ によって，二つのエルミート演算子 $|a\rangle\langle a|$ と $|b\rangle\langle b|$ がつくられるが，この二つの演算子の積 $|a\rangle\langle a|b\rangle\langle b|$ は，エルミートでない $|a\rangle\langle b|$ に比例する．それゆえこの積はエルミートでない（$|a\rangle$ と $|b\rangle$ が直交する場合を除く．このとき積は0になる）．

エルミート演算子 H が正の定符号であるといわれるのは，

$$\text{任意の}\quad u\rangle \text{ に対して } \langle u|H|u\rangle \geqslant 0$$

となるときである．演算子 $|a\rangle\langle a|$ は正の定符号のエルミート演算子の一つである．

この型の演算子は注意すべき性質をもっている（問題7と8を参照）．特に，H が正の定符号のエルミートであるとき，一般化されたシュワルツの不等式

$$|\langle u|H|v\rangle|^2 \leqslant \langle u|H|u\rangle\langle v|H|v\rangle$$

が得られ，これは任意の $|u\rangle$ と $|v\rangle$ について成り立つ．等号が成立するのは，$H|u\rangle$ と $H|v\rangle$ が比例するときに限る．さらに，等式

$$\langle u|H|u\rangle = 0$$

から必然的に $H|u\rangle = 0$ が導かれる．

演算子 U がユニタリと呼ばれるのは，U がその随伴演算子の逆になっているときである．

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1.$$

二つのユニタリ演算子 U，V の積 $W = UV$ はユニタリ演算子である．実際（性質 (15) と (24))，

$$W^{-1} = V^{-1}U^{-1} = V^\dagger U^\dagger = W^\dagger.$$

§9. 固有値問題とオブザーバブル

A を線形演算子とする．複素数 a が A の固有値であり，ケット $|u\rangle$ が a に対応する固有ケットであると定義するのは，

$$A|u\rangle = a|u\rangle$$

のときである．同様に，

$$\langle u'|A = a'\langle u'|$$

のとき，$\langle u'|$ は固有値 a' に対応する固有ブラである．

$|u\rangle$ が A の固有ケットならば，このケットベクトルのスカラー倍 $c|u\rangle$ はすべて同じ固有値に関する A の固有ケットである．同じ固有値 a に関して，線形独立な固有ケッ

(*) ［訳注］ 線形独立という意味に解さなければならない．

トがいくつかあるとき，これらのケットの線形結合はすべてこの固有値に関する A の固有ケットである．言いかえれば，与えられた固有値 a に関する A の固有ケットの全体は一つのベクトル空間をつくる．これを固有値 a に関する部分空間と名づけよう．この部分空間が1次元しかもたないとき，この固有値は単純である，あるいは縮退していないという．そうでないときには縮退があり，縮退の位数はこの部分空間の次元数であると定義する．縮退の位数が無限大となることもありうる．

同じ注意は A の固有ブラについてもあてはまる．A が任意のときは，ケットに関する固有値問題とブラに関する固有値問題とのあいだに簡単な関係が存在しない．しかし，実際上興味のあるのは A がエルミートのときだけであって，この場合には上の二つの問題は密接に結びついている．

事実，A がエルミートならば，つぎの性質が得られる．

i) 双方の固有値のスペクトルは同じである．

ii) 固有値はすべて実数である．

iii) A の固有ケットに共役なブラはいずれも，同じ固有値に関する固有ブラであり，逆も正しい．言いかえれば，与えられた固有値に関する固有ブラの部分空間は，同じ固有値に関する固有ケットの部分空間の双対である．

性質 ii) の証明は，記号を除けば，第5章§5のそれと同じである．$A=A^{\dagger}$ で $A|u\rangle = a|u\rangle$ ならば，

$$\langle u|A|u\rangle = a\langle u|u\rangle, \qquad \langle u|A|u\rangle^* = \langle u|A^{\dagger}|u\rangle = \langle u|A|u\rangle$$

であるから $\langle u|A|u\rangle$ は実数であり，$\langle u|u\rangle$ もそうである．したがって a は実数である．ブラに関する固有値に対しても同じように証明することができる．

さらに，固有値はすべて実数であるから，$A|u\rangle = a|u\rangle$ から必ず $\langle u|A = a\langle u$ が導かれ，逆も成り立つ．このことから性質 i) と iii) は容易に導き出される．

エルミート演算子の固有値の性質としてもう一つ重要なのは，異なる固有値に関する固有ベクトルが直交するという性質である．証明は，この場合も第5章 §5のそれをひき写せばよい．$|u\rangle$ と $|v\rangle$ がそれぞれ固有値 a と b に関する固有ケットならば，

$$A|u\rangle = a|u\rangle, \qquad \langle v|A = b\langle v|.$$

第一式に左から $\langle v|$ を掛けて内積をとり，第二式に右から $|u\rangle$ を掛けて内積をとり，両辺を引くと，

$$0 = (a-b)\langle v|u\rangle.$$

したがって，$a \neq b$ ならば

$$\langle v|u\rangle = 0.$$

これまでのすべての議論においては，固有ベクトルがヒルベルト空間に現われることを暗黙のうちに仮定している．このようにすると，固有値問題に関する制限が大きくなりすぎて，理論の要求をすべて満たすことはできなくなる．§4の終りに述べた条件にしたがうノルム無限大のベクトルも，また固有解として許されると考えなければならない．これらのベクトルは連続スペクトルの固有値に結びつけられる．

連続スペクトルのむずかしい点については第5章で詳しく論じたから，ここでまたその問題にもどる必要はない．この議論の主な結果はわれわれの新しい用語にたやすく翻訳される．性質 i)，ii)，iii) は連続スペクトルの場合にもそのまま成り立つ．直交する性質の方は，ディラックの δ《関数》を使うとうまく表現される．

もう一度第5章 §9のエルミート演算子を例にとろう．この固有値のスペクトルはとびとびの値の列 a_n と連続な部分 $a(\nu)$ とを含む．固有値 a_n に関するいくつかの固有関数 $\varphi_n^{(r)}$ は直交規格化ケットを表わすが，これらのケットをそれぞれ $|nr\rangle$ という記号で示す．同様に，固有関数 $\varphi^{(r)}(\nu,\rho)$ はケット $|\nu\rho r\rangle$ を表わす．これらのいろいろなケットのあいだにある直交規格化関係はつぎのように書かれる（第5章 (38)）．

$$\langle nr|n'r'\rangle=\delta_{nn'}\delta_{rr'} \tag{30 a}$$

$$\langle nr|\nu'\rho'r'\rangle=0 \tag{30 b}$$

$$\langle \nu\rho r|\nu'\rho'r'\rangle=\delta(\nu-\nu')\,\delta(\rho-\rho')\,\delta_{rr'}. \tag{30 c}$$

これらのベクトルの全体が全空間を張るならば，言いかえると，ノルム有限な任意のベクトルがこれらのベクトルの級数（または積分）に展開されるならば，これらは完全系をつくると言い，このエルミート演算子はオブザーバブルと呼ばれる．空間 $\mathcal{E}$ のエルミート演算子のうちで物理的解釈をもちうるものはオブザーバブルだけである．

与えられたエルミート演算子がオブザーバブルであるかどうかを知るという重要な問題は，多くの場合困難な数学的問題である．しかし，一群のきわめて重要な演算子に対してこの問題が容易に解決される．それは射影子の一群である．

§10. 射影子（または射影演算子）

ヒルベルト空間 $\mathcal{E}$ の部分空間の一つを $\mathcal{S}$ とし，その補空間を $\mathcal{S}^\times$ とする．任意のケット $|u\rangle$ は $\mathcal{S}$ への射影と $\mathcal{S}^\times$ への射影をもつ．これら二つのベクトル $|u_S\rangle$ と $|u_S^\times\rangle$ は一意的に定まり，

$$|u\rangle=|u_S\rangle+|u_S^\times\rangle \tag{31}$$

が成り立つ．したがって各ケット $|u\rangle$ にただ一つのケット $|u_S\rangle$ が対応する．容易に

わかるように，この対応は線形である．それによって，部分空間 $\mathcal{S}$ への射影子（または $\mathcal{S}$ への射影演算子）と呼ばれる一つの線形演算子 P_S が定められる：

$$P_S\,|\,u\,\rangle = |\,u_S\,\rangle.$$

これはエルミート演算子である．実際，任意の $|v\rangle$ に対して

$$\langle\,u\,|\,P_S\,|\,v\,\rangle = \langle\,u\,|\,v_S\,\rangle = \langle\,u_S\,|\,v_S\,\rangle = \langle\,u_S\,|\,v\,\rangle.$$

したがって

$$\langle\,u\,|\,P_S = \langle\,u_S\,|.$$

P_S は明らかにオブザーバブルであって，その固有値は0と1の二つだけであり，それぞれの値の部分空間は $\mathcal{S}^\times$ と $\mathcal{S}$ である．

さらに，任意の $|\,u\,\rangle$ に対して

$$P_S^2\,|\,u\,\rangle = P_S(P_S\,|\,u\,\rangle) = P_S\,|\,u_S\,\rangle = |\,u_S\,\rangle = P_S\,|\,u\,\rangle$$

であるから，P_S は演算子のあいだの方程式

$$P_S^2 = P_S$$

を満たす．

逆に，方程式

$$P^2 = P \tag{32}$$

を満たすエルミート演算子 P はすべて射影子である．射影の落ちる部分空間 $\mathcal{S}$ は，その固有値1の部分空間である．

事実，p をこの演算子の固有値とし，対応する固有ベクトルの一つを $|\,p\rangle$ とすれば，

$$P|\,p\,\rangle = p\,|\,p\,\rangle.$$

(32) により，

$$0 = (P^2-P)\,|\,p\,\rangle = (p^2-p)\,|\,p\,\rangle$$

で，ケット $|\,p\rangle$ は0でないから，$p^2-p=0$．言いかえれば，P の固有値に等しくなりうる値は0と1だけである．

一方，任意のベクトル $|\,u\,\rangle$ は P の固有ベクトルの和の形に表わされるから，P はオブザーバブルである．実際，まず

$$|\,u\,\rangle = P\,|\,u\,\rangle + (1-P)\,|\,u\,\rangle \tag{33}$$

が得られるが，(32) により

$$P^2\,|\,u\,\rangle \equiv P(P\,|\,u\,\rangle) = P\,|\,u\,\rangle$$

であるから，ベクトル $P|\,u\,\rangle$ は固有値1に関する P の固有ケットである．同様に

$$P(1-P)\,|\,u\,\rangle = (P-P^2)\,|\,u\,\rangle = 0$$

であるから，ベクトル $(1-P)\,|\,u\,\rangle$ は固有値0に関する P の固有ケットである．容易にわかるように，ベクトル $P|\,u\,\rangle$ と $(1-P)\,|\,u\,\rangle$ は直交し，その結果，これらのノルムの和は $|\,u\,\rangle$ のノルムに等しい．それゆえ，これら二つのベクトルは確かに有限なノルムをもつ，すなわちヒルベルト空間に属する．

固有値1に関する P の固有ベクトルの空間を $\mathcal{S}$ とする．$\mathcal{S}$ の補空間である部分空間

$\mathcal{S}^\times$，すなわち部分空間 $\mathcal{S}$ のベクトルに直交するベクトルの部分空間は，固有値0に関する P の固有ベクトルの全体から成る．分割 (33) により，任意のベクトル $|u\rangle$ に対する P の作用は，このベクトルの $\mathcal{S}$ への射影を与える．それゆえ P は確かに $\mathcal{S}$ への射影子である．$(1-P)$ が $\mathcal{S}^\times$ への射影子であることも明らかである．

$P|u\rangle$ のノルムに関して上に述べた性質は

$$0 \leqslant \langle u|P|u\rangle \leqslant \langle u|u\rangle \tag{34}$$

と書き直される．

$\langle u|P|u\rangle = 0$ ならば，$|u\rangle$ はまったく $\mathcal{S}^\times$ 内にある．

$\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle$ ならば，$|u\rangle$ はまったく $\mathcal{S}$ 内にある．

二つの極端な場合は注意する価値がある．射影の空間 $\mathcal{S}$ が空間 $\mathcal{E}$ そのものであるとき，ケット $|u\rangle$ はつねにそれ自身の射影である．このとき任意の $|u\rangle$ に対して $\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle$ となり，補空間 $\mathcal{S}^\times$ は0である．これは $P=1$ の場合である．

もう一つの極端な場合は空間 $\mathcal{S}$ が0のときである（この場合補空間 $\mathcal{S}^\times$ は空間 $\mathcal{E}$ そのものになる）．すなわち任意の $|u\rangle$ に対して $\langle u|P|u\rangle = 0$．これは $P=0$ の場合である．

事柄を明らかにするため，典型的な射影子の例をいくつかあげよう．

$|a\rangle$ は1に規格化されたケットとする．これは1次元の部分空間を張る．任意のベクトル $|u\rangle$ のこの部分空間への射影を $|u_a\rangle$ で表わす：

$$|u\rangle = |u_a\rangle + |u_a^\times\rangle. \tag{35}$$

仮定により

$$\langle a|u_a^\times\rangle = 0, \qquad |u_a\rangle = c\,|a\rangle.$$

(35) の両辺に左から $\langle a|$ を掛けて内積をとれば，$c = \langle a|u\rangle$ となる．それゆえ

$$|u_a\rangle = |a\rangle\langle a|u\rangle.$$

したがって，$|a\rangle$ への射影子は演算子

$$P_a \equiv |a\rangle\langle a| \qquad (\langle a|a\rangle = 1) \tag{36}$$

である．この型の射影子を素射影子と呼ぶことにする．

今度は直交規格化ベクトルの列 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |N\rangle$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \qquad (m, n = 1, 2, \cdots, N)$$

を考えよう．これらのベクトルはケットベクトル空間のなかに一つの（N次元）部分空間 $\mathcal{E}_1$ を張り，そのなかにはこれらのベクトルも入っている．容易にわかるように，演算子

$$P_1 \equiv \sum_{m=1}^{N} |m\rangle\langle m| \tag{37}$$

は $\mathcal{E}_1$ への射影子である.

これまで考えてきたベクトルはすべて有限なノルムをもつと仮定した. しかし, ある領域 (ξ_1, ξ_2) を動く連続変数 ξ に依存する一連のケットベクトル $|\xi\rangle$ を同じように考えることもできる. これらのケットからつくられる固有微分は有限なノルムをもち, われわれが調べているヒルベルト空間のなかに現われると仮定する. したがって, これらのベクトルの線形結合もまたすべてヒルベルト空間に属し, これらの線形結合の全体は全ヒルベルト空間のある部分空間 $\mathcal{E}_2$ をつくる. $\mathcal{E}_2$ はベクトル $|\xi\rangle$ によって張られた部分空間である. さらにこれらのベクトルは《直交規格化》条件

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \delta(\xi' - \xi) \tag{38}$$

を満たすと仮定する.

明らかに,

$$P_2 \equiv \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle \mathrm{d}\xi \langle \xi| \tag{39}$$

は $\mathcal{E}_2$ への射影子である. 実際, 任意に与えられたベクトル $|u\rangle$ に P_2 が作用した結果として得られるベクトル

$$P_2 |u\rangle \equiv \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle \mathrm{d}\xi \langle \xi | u\rangle$$

は, ベクトル $|\xi\rangle$ の線形結合であるから確かに $\mathcal{E}_2$ のなかにある. また差 $(1-P_2)|u\rangle$ は列 $|\xi\rangle$ の各ベクトルと直交する:

$$\begin{aligned}\langle \xi' | (1-P_2) | u\rangle &= \langle \xi' | u\rangle - \int_{\xi_1}^{\xi_2} \langle \xi' | \xi\rangle \mathrm{d}\xi \langle \xi | u\rangle \\ &= \langle \xi' | u\rangle - \int_{\xi_1}^{\xi_2} \delta(\xi' - \xi) \mathrm{d}\xi \langle \xi | u\rangle = 0,\end{aligned}$$

したがって $\mathcal{E}_2$ に直交する.

§11. 射影子の代数

ヒルベルト空間の射影子はごく簡単な幾何学的意味をもつので大きな興味をよぶ[5]. こ

---

[5] フォン・ノイマンの方法による連続スペクトルの取り扱いの基礎は, ヒルベルト空間の射影子の性質の体系的な研究にある. これによって, ヒルベルト空間の外へはけっして出ることなく, 連続スペクトルのあらゆる困難が克服されることになる.

こでは，この演算子の代数の主な性質を述べる．たいていの場合，証明は初等的であるから，簡潔に方針を与えるだけにとどめ，それを補うのは読者に委ねよう．

ヒルベルト空間 $\mathcal{E}$ の部分空間 $\mathcal{E}_i$，$\mathcal{E}_j$ への射影子を P_i，P_j とする．積

$$P_{[ij]} \equiv P_i P_j$$

もまた射影子であるためには，P_i と P_j の交換することが必要十分である．

この条件がなければ $P_{[ij]}$ がエルミートでなくなるから，条件は必要である．条件が満たされると $P_{[ij]}$ はエルミートで，

$$P_{[ij]}^2 = P_i P_j P_i P_j = P_i^2 P_j^2 = P_i P_j = P_{[ij]}$$

が成り立つから，条件は十分である．

対応する部分空間 $\mathcal{E}_{[ij]}$ は部分空間 $\mathcal{E}_i$ と $\mathcal{E}_j$ の共通部分，すなわち $\mathcal{E}_i$ と $\mathcal{E}_j$ に共通なベクトルから成る部分空間である．二つの極端な場合として，$\mathcal{E}_{[ij]}$ が初めに考えた二つの部分空間の一つ，たとえば $\mathcal{E}_j$ に等しい場合と，$\mathcal{E}_{[ij]}$ が 0 になる場合が起こりうる．第一の場合，$\mathcal{E}_j$ は $\mathcal{E}_i$ の部分空間であり，第二の場合，$\mathcal{E}_i$ と $\mathcal{E}_j$ は直交する．

つぎの二つの性質は容易に証明される．

$\mathcal{E}_j$ が $\mathcal{E}_i$ の部分空間であるためには（すなわち，部分空間 $\mathcal{E}_j$ のベクトルがすべて部分空間 $\mathcal{E}_i$ のベクトルであるためには），

$$P_i P_j = P_j$$

が必要十分である．

$\mathcal{E}_i$ と $\mathcal{E}_j$ が直交するためには，

$$P_i P_j = 0 \tag{40}$$

が必要十分である．この場合，用語の意味をひろげて，これらの射影子は直交すると言う．

射影子の和に関しては重要な定理がある．

$P_i, P_j, P_k, \cdots$ をそれぞれ部分空間 $\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j, \mathcal{E}_k, \cdots$ への射影子とする．これらの和 $P_i + P_j + P_k + \cdots$ がまた射影子であるためには，これらの演算子のどの二つも直交することが必要十分である．射影の落とされる部分空間は，部分空間 $\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j, \mathcal{E}_k, \cdots$ の合併あるいは直和（すなわち，これらの部分空間のいずれか一つに属するベクトルの線形重ね合わせによってつくられるベクトルの全体）である．

直交の条件は明らかに十分である．それが必要であることを示すには，二つの演算子の

和 $S=P_i+P_j$ の場合に証明しさえすればよい．S は明らかにエルミートである．さらに $S^2=S$ であるためには，$P_iP_j+P_jP_i=0$ でなければならない．この等式の両辺に P_i をまず左から，ついで右から掛けると，

$$P_iP_j+P_iP_jP_i=P_iP_jP_i+P_jP_i=0$$

となる．これから

$$P_iP_j=P_jP_i=\frac{1}{2}(P_iP_j+P_jP_i)=0.$$

(37) によって定められた演算子 P_1 は，直交する射影子の和の一例である．この場合は，和のなかに現われる射影子 $|m\rangle\langle m|$ が素射影子になっている．ごく明らかなことであるが，射影の落とされる空間 $\mathcal{E}_1$ は，和の各項による射影が落とされる空間の合併である．$\mathcal{E}_1$ は1次元の空間を N 個合併したものであるから，N 次元の空間であり，一方演算子 P_1 は直交する N 個の素射影子の和である．

$N\neq 1$ ならば，P_1 をこの形に表わす方法は無数にある．実際，$\mathcal{E}_1$ にある N 個の直交規格化ベクトルの列 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |N\rangle$ を $\{n\}$ で表わそう．$\mathcal{E}_1$ のベクトルはすべてこれら N 個のベクトルの線形結合として表わされるという意味で，列 $\{n\}$ は $\mathcal{E}_1$ の基底ベクトル系をつくる．便宜上，二つの基底系のベクトルが位相因子を除いて同じ場合，あるいは一つ一つ並べられている順序を除いて同じ場合には，これら二つの系を異なる系とみなさないことにする．このとき，明らかに

$$P_1=\sum_{n=1}^{N}|n\rangle\langle n|$$

であり，異なる基底系が幾組とれるかによって，P_1 をこの型に表わす方法もその数だけ存在する．

これらの考察は，射影の落とされる部分空間 $\mathcal{S}$ が無限の次元をもつ場合にも大きな修正をせずに拡張される．ヒルベルト空間論によれば，$\mathcal{S}$ のなかで可算無限個の直交規格化ベクトルから成る基底系 $\{n\}\equiv\{|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |n\rangle, \cdots\}$ をいつでも選ぶことができ，その方法は無数にあることが証明される．このとき $\mathcal{S}$ への射影子 P は直交素射影子の級数の形：

$$P=\sum_{n=1}^{\infty}|n\rangle\langle n|$$

に書き表わされる．

しかしまた，連続変数に依存するケットから成る $\mathcal{S}$ の基底系がつくられることもありうる．たとえば，ノルム無限大のベクトル $|\xi\rangle$ の（非可算無限）集合が存在し，これら

のベクトルは連続変数 ξ に依存し，《直交規格化》関係 (38) を満たすと仮定しよう．また，部分空間 $\mathcal{S}$ は，ある領域 (ξ_1,ξ_2) におけるケット $|\xi\rangle$ の線形重ね合わせによって生じるノルム有限なベクトルの全体から成ると仮定する．この場合にも，Pは (39) 型の式

$$P=\int_{\xi_1}^{\xi_2}|\xi\rangle\mathrm{d}\xi\langle\xi|$$

によって表わされる．この形をとっても，Pはやはり直交射影子の和のようにみなされる．積分領域 (ξ_1,ξ_2) をいくつかの部分領域に分割しよう．これらの部分領域のおのおのにおいて $|\xi\rangle\mathrm{d}\xi\langle\xi|$ を積分すると射影子が得られ，P はそれらの和である．他方，これらの部分領域はいくらでも小さくできる．無限小領域 $(\xi,\xi+\delta\xi)$ における積分によって得られた演算子を δP によって表わそう．

$$\delta P=\int_{\xi}^{\xi+\delta\xi}|\xi'\rangle\mathrm{d}\xi'\langle\xi'|.$$

P は δP の型の演算子を無限個加えたものである．δP の型の演算子を微分射影子と名づける．この型の演算子に対応する射影の空間は無限次元である．

§12. 完全にとびとびのスペクトルをもつオブザーバブル

Aをエルミート演算子とする．ここでは，ヒルベルト空間のなかにある固有ベクトルに限って固有値問題を調べる．このとき固有値はとびとびの列 $a_1,a_2,\cdots,a_n,\cdots$ をつくる．固有値 a_n に関する部分空間を $\mathcal{E}_n$ としこの部分空間への射影子を P_n で表わす．固有値 a_n が縮退していないときには $\mathcal{E}_n$ は1次元しかもたず，P_n は素射影子である．そうでないときには，$\mathcal{E}_n$ の基底系が無数にあるが，そのうちの一つ $|n1\rangle,|n2\rangle,\cdots,|nr\rangle,\cdots$ を選ぶことができ，

$$P_n=\sum_r|nr\rangle\langle nr| \tag{41}$$

となる．

二つの異なる固有値 a_n，$a_{n'}$ に関する部分空間 $\mathcal{E}_n$，$\mathcal{E}_{n'}$ は直交し，その結果

$$P_nP_{n'}=0 \qquad (n\neq n'). \tag{42}$$

このとびとびのスペクトルに属する固有値に対応する射影子 P_n を全部加えると，射影子

$$P_A\equiv\sum_n P_n \tag{43}$$

が得られる．この射影の部分空間 $\mathcal{E}_A$ は，すべての $\mathcal{E}_n$ の直和から成る．$\mathcal{E}_A$ はヒルベルト空間のなかにある A の固有ケットの線形重ね合わせによってつくられるベクトル空間である．

A がオブザーバブルで，そのスペクトルが完全にとびとびであるならば，$\mathcal{E}_A$ は定義により全空間 $\mathcal{E}$ に一致する．言いかえれば，

$$P_A \equiv \sum_n P_n = 1. \tag{44}$$

(44) の左辺はしばしば A の固有値に関する1の分解と呼ばれる．明らかにこの分解は一意的であり，したがって任意のケット $|u\rangle$ は，それぞれ異なる固有値に関する A の固有ケットの和として一意的に表わされる．この和を書き表わすには，等式 (44) の両辺をケット $|u\rangle$ に適用し，このようにして得られた二つのケットを等しいと置けばよい．すなわち，

$$|u\rangle = \sum_n P_n |u\rangle \tag{45}$$

が得られる．

P_n の定義によれば，$|u\rangle$ が何であっても，$P_n|u\rangle$ は0であるかまたは固有値 a_n に関する A の固有ケットである．したがって

$$(A-a_n)P_n = 0. \tag{46}$$

等式 (44) の両辺に A を掛け，(46) を使うと

$$A = \sum_n a_n P_n \tag{47}$$

となる．この式によれば，オブザーバブル A の固有値と，各固有値の部分空間を与えることによって，A は完全に決定される．さらに，演算子 A を表わす式 (47) によって容易に示されるように，A はすべての射影子 P_n と交換する．

関係 (44), (45), (47) は完全にとびとびのスペクトルをもつオブザーバブルを特徴づけるものであり，その固有値の個数は有限でも無限でもよい．ここではこの級数の収束に関する問題には立ち入らない．実際にはいつでもこの収束が成り立つのである．

P_n をそれぞれ (41) によって全部置き換えてしまうと，特に便利な表現が得られる．たとえば，(44) の左辺は素射影子の和の形に表わされ，完全性関係

$$P_A \equiv \sum_{n,r} |nr\rangle\langle nr| = 1 \tag{48}$$

が得られる．直交関係

$$\langle nr|n'r'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'} \tag{49}$$

と合わせて，これらの関係はベクトル $|nr\rangle$ の全体が完全直交規格化系をつくることを示す．

任意のベクトル $|u\rangle$ に完全性関係を適用すると，固有ベクトル $|nr\rangle$ による $|u\rangle$ の級数展開

$$|u\rangle = \sum_{n,r} |nr\rangle\langle nr|u\rangle \tag{50}$$

が得られる．この展開の係数は内積 $\langle nr|u\rangle$ に等しい（第5章（14），（15）を参照）．さらに，

$$\langle u|u\rangle = \langle u|P_A|u\rangle = \sum_{n,r}\langle u|nr\rangle\langle nr|u\rangle = \sum_{n,r}|\langle nr|u\rangle|^2. \tag{51}$$

$|u\rangle$ のノルムは展開の係数の絶対値を二乗して加えたものに等しい．これはパーセバルの条件である（第5章（16）を参照）．

オブザーバブル A は直交する素射影子の級数の形で表わされる．実際，（47）を導いたのと同じような手続きによって，

$$A = AP_A = \sum_{n,r}|nr\rangle a_n\langle nr| \tag{52}$$

が得られる．

§13．一般の場合のオブザーバブルと一般化された完全性関係

エルミート演算子 A がオブザーバブルになるのは，A の固有ベクトルの重ね合わせによってつくられるノルム有限なベクトルの空間 $\mathcal{E}_A$ がヒルベルト空間 $\mathcal{E}$ そのものに一致する場合，あるいは同じことであるが，$\mathcal{E}_A$ への射影演算子 P_A が1に等しい場合である．

スペクトルが完全にとびとびのときには，A の固有ベクトルからつくられた直交素射影子の級数による展開の形で P_A が表わされ，A がオブザーバブルとなるための条件は完全性関係（48）によってうまく表わされる．一般の場合にこの関係を拡張するには，微分射影子の導入が必要である．とびとびのスペクトルを取り扱うとき素射影子が演じる役割はスペクトルの連続な部分を取り扱うとき，この微分射影子によって果たされる．

まず A のスペクトルにまったく縮退がない場合を扱う．このスペクトルは，連続な変数 ν を目じるしとする連続な部分と，整の変数 n を目じるしとするとびとびの部分から成るとする．それゆえ a_n はとびとびのスペクトルの固有値であり，$a(\nu)$ は連続スペクトルの固有値である．$a(\nu)$ は ν の単調関数であり，ある区間 $(a(\nu_1), a(\nu_2))$ に属するすべての値をとる．固有値 a_n と $a(\nu)$ に対する固有ケットをそれぞれ $|n\rangle$ と $|\nu\rangle$ で表わす．これらのケットは直交規格化されている．特に

$$\langle\nu|\nu'\rangle = \delta(\nu-\nu').$$

演算子

$$\delta P = \int_{\nu}^{\nu+\delta\nu} |\nu'\rangle \mathrm{d}\nu' \langle\nu'|$$

は区間 $(\nu, \nu+\delta\nu)$ のケット $|\nu'\rangle$ によって張られた部分空間への射影子である．この型の射影子を加えることによって，空間 $\mathcal{E}$ のベクトルから成る部分空間 $\mathcal{E}_c$ への射影子

$$P_c = \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle \mathrm{d}\nu \langle\nu|$$

がつくられ，$\mathcal{E}_c$ は連続スペクトルの固有ケットによって張られている．この部分空間は，とびとびのスペクトルの固有ケットによって張られる部分空間 $\mathcal{E}_d$ に直交し，$\mathcal{E}_d$ への射影子は

$$P_d = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

である．A がオブザーバブルであるための条件は

$$P_A \equiv P_c + P_d = 1,$$

すなわちまた，

$$P_A \equiv \sum_n |n\rangle\langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle \mathrm{d}\nu \langle\nu| = 1 \tag{53}$$

と書かれる．完全性関係 (53) は，直交規格化ベクトル $|n\rangle$, $|\nu\rangle$ の全体が完全系をつくるための必要十分条件である．

A のスペクトルの全部あるいは一部が縮退しているような最も一般的な場合に拡張するのも困難なことではない．明確に言い表わすため，§9の終りに述べた例をとろう．A の固有ケット $|nr\rangle$, $|\nu\rho r\rangle$ は直交規格化関係 (30) を満たす．さらに A がオブザーバブルであるとき，言いかえると，これらのケットが完全系をつくるときには，これらは完全性関係

$$\boxed{P_A \equiv \sum_{n,r} |nr\rangle\langle nr| + \sum_r \iint |\nu\rho r\rangle \mathrm{d}\nu\, \mathrm{d}\rho \langle\nu\rho r| = 1} \tag{54}$$

を満たす．

スペクトルが完全にとびとびである場合と同じように，ヒルベルト空間の任意のベクトル $|u\rangle$ を，オブザーバブル A の基底に属するケットの級数に展開するためには，完全性関係を使うのがきわめて便利である．書きやすくするために，A のスペクトルは縮退していないとする（関係式 (53)）．このとき

$$|u\rangle = P_A|u\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|u\rangle + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle \mathrm{d}\nu \langle\nu|u\rangle. \tag{55}$$

同じようにして，一般化されたパーセバルの関係

$$\langle u|u\rangle = \langle u|P_A|u\rangle = \sum_n |\langle n|u\rangle|^2 + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\langle\nu|u\rangle|^2 \mathrm{d}\nu \tag{56}$$

と，射影子の級数による A の展開

$$A = AP_A = \sum_n |n\rangle a_n \langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle a(\nu) \mathrm{d}\nu \langle\nu| \tag{57}$$

が得られる.

最後に，連続スペクトルの固有ベクトルを規格化するときの条件は，場合によりもっと一般的な条件

$$\langle \nu | \nu' \rangle = f(\nu)\,\delta(\nu-\nu')$$

に置き換えた方が便利であるということを注意しておく．ただし $f(\nu)$ は ν の正の実関数である．これは各ベクトル $|\nu\rangle$ に大きさ $\sqrt{f}$ の定数を掛けることになる．この場合も，すべての式において微分要素

$$|\nu\rangle \mathrm{d}\nu \langle \nu| \qquad を \qquad |\nu\rangle \frac{\mathrm{d}\nu}{f(\nu)} \langle \nu|$$

に置き換えさえすれば，今までに述べたことはそのまま成り立つ．同様に，規格化条件 (30 c) を

$$\langle \nu \rho r | \nu' \rho' r' \rangle = F_r(\nu, \rho)\,\delta(\nu-\nu')\,\delta(\rho-\rho')\,\delta_{rr'}$$

に置き換えるときには，完全性関係 (54) において被積分関数を関数 $F_r(\nu, \rho)$ で割りさえすれば，P_A を表わす式はそのまま成り立つ.

§14. オブザーバブルの関数

一つの直交規格化固有ベクトルの完全系があるとき，この各ベクトルに対する一つの線形演算子の作用が知られれば，この演算子は完全に決定される．これらのベクトルのどんな線形重ね合わせに対する作用も，無限級数を取り扱うときは収束を条件として，これからただちに導かれる（収束の条件はすでに第5章で述べられている)．特に，オブザーバブル A の固有値の関数 $f(a)$ を任意に与えると，このオブザーバブル A の関数 $f(A)$ として一つの線形演算子が定義される．A の固有値 a に関する固有ベクトル $|a\rangle$ に対する $f(A)$ の作用は

$$f(A)|a\rangle = f(a)|a\rangle \tag{58}$$

であると定義する.

関数fが多項式であるときは，この定義は演算子代数の法則を単純に適用して得られる結果と一致する．しかしこの定義はもっと一般の場合にも意味を失わない.

定義そのものから，A の固有ベクトルはすべて $f(A)$ の固有ベクトルであることがわかる.

逆に，オブザーバブル A の各固有ベクトルが線形演算子 F の固有ベクトルであるならば，F は A の関数である.

A の固有値が一つも縮退していないとき，このことはほとんど自明である．そこで縮退した固有値を考え，この固有値に対する二つの線形独立な固有ベクトルを $|a1\rangle, |a2\rangle$ としよう．仮定により，これらは F の固有ベクトルであり，

$$F|a1\rangle = f_a^{(1)}|a1\rangle, \qquad F|a2\rangle = f_a^{(2)}|a2\rangle.$$

一方，これら二つのベクトルの線形結合はすべて F の固有ベクトルであり，

$$F(\lambda_1|a1\rangle + \lambda_2|a2\rangle) = f_a^{(\lambda)}(\lambda_1|a1\rangle + \lambda_2|a2\rangle).$$

したがって，

$$\lambda_1(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(1)})|a1\rangle + \lambda_2(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(2)})|a2\rangle = 0$$

となり，$|a1\rangle$ と $|a2\rangle$ は線形独立であるから，

$$f_a^{(1)} = f_a^{(\lambda)} = f_a^{(2)}.$$

それゆえ，A の一つの固有値 a に対するいくつかの固有ベクトルは，いずれも F の一つの固有値 f に対する固有ベクトルである．f は a の関数であり，これを $f(a)$ とする．これで $F = f(A)$ が得られる．

オブザーバブル A の任意の関数 $f(A)$ も，A そのものと同じように，素射影子あるいは微分射影子の線形結合の形に表わされる．具体的に考えるため，A は等式 (57) を満たすとしよう．この場合にも，

$$f(A) = f(A)P_A = \sum_n |n\rangle f(a_n)\langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle f[a(\nu)]\, \mathrm{d}\nu \langle\nu| \tag{59}$$

が得られる．

オブザーバブル A の関数の例として，ある特定の固有値の部分空間への射影子や，ある範囲に属する固有値に対する固有ベクトルによって張られる空間への射影子があげられる．また，指数関数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi A}$ (ξ は与えられた定数) や逆 A^{-1} をあげておく．関数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi A}$ はつねに定義される．逆 A^{-1} が明確に定義されるのは，A の固有値が一つも0にならない場合だけである．

§15. 一つのオブザーバブルと交換する演算子．交換するオブザーバブル

オブザーバブル A の関数は，もっと一般的な演算子，A と交換する演算子のクラスに属する．このような演算子は，A の固有ベクトルに対して特に簡単な作用をおよぼす．実際，$|a\rangle$ が A の固有ベクトルで

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

となり，また

$$[A, X] = 0$$

ならば，

$$0=(AX-XA)|a\rangle=(A-a)X|a\rangle$$

が得られ，$X|a\rangle$ は（0でない限り）同じ固有値に対する A の固有ベクトルである．

逆に，演算子 X がオブザーバブル A と交換するためには，A の固有ベクトルの完全直交規格化系に属する各ベクトルに X が作用するとき，同じ固有値に対する A の固有ベクトルが生じるならば十分である．

実際，この仮定によれば，この完全系に属する各ベクトルに交換子 $[A,X]$ が作用した結果は0となる．したがって確かに $[A,X]=0$ を得る．

すべてこれらのことは特別な場合として交換するオブザーバブルにも適用される．さらに，交換するオブザーバブルに関して第5章§14，§15で展開した考察は，いくつかの細かい用語を除けば，すべてここで繰り返すことができる．これについては結果だけを簡単に述べておく．

与えられたオブザーバブルの固有ベクトルから成る任意の完全直交規格化系を，このオブザーバブルの基底系と呼ぶ．ただし二つの系の固有ベクトルをくらべて，位相の因数，とびとびのスペクトルに属するものについてはそれを並べる順序，連続スペクトルに属するものについては連続変数の選び方だけが異なるとき，これら二つの系は同じであると規約する．

われわれはつぎの重要な定理を得る．

二つのオブザーバブル A と B が交換するならば，それらは少なくとも一つの基底系を共有し，逆に，二つのオブザーバブル A と B が一つの基底系を共有するならば，それらは交換する．

交換する二つのオブザーバブル A と B の固有値の関数 $f(a,b)$ を任意に与えると，これら二つのオブザーバブルの関数として一つの線形演算子 $f(A,B)$ を定めることができる．これは一つのオブザーバブルの関数という概念の明白な一般化として得られる．容易に示されるように，オブザーバブル A と B に共通な各固有ベクトルがある線形演算子 F の固有ベクトルになっているならば，F は A と B のある関数である．

これらすべてのことは，どの二つをとっても交換するような任意個のオブザーバブルに対しても容易に一般化される．

最後に，オブザーバブル $A,B,C,\cdots$ からどの二つをとっても交換し，これらに共通な基底系がただ一つ定まるとき，これらのオブザーバブルの列は交換するオブザーバブルの完全集合であるという．固有値 $a,b,c,\cdots$ の各組に対して，（定数を除いて決まった）共通の固有ベクトルがただ一つだけ対応する．このベクトルは固有値 $a,b,c,\cdots$ の関数とみな

される．これをふつうは記号 $|abc\cdots\rangle$ で表わす．

III. 表　現　論

§16. 有限行列についての一般的な概念

行列の定義によれば，$M\times N$ 型の行列 A は MN 個の量 A_{mn} $(m=1,2,\cdots,M;\ n=1,2,\cdots,N)$ の全体であり，これらはふつう M 行 N 列の長方形の表に配列される．

$$(A)\equiv\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots\cdots & A_{1N} \\ A_{21} & \cdots\cdots & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{M1} & \cdots\cdots & & A_{MN}\end{pmatrix}.$$

A_{mn} はこの行列の第 m 行第 n 列の要素である．

$M=N$ のとき，これは正方行列である．その行および列の数はこの行列の次元数あるいは次数である．整数 M または N が1に等しいとき，この行列の要素は一つのベクトルの成分と同一視される．1列の行列 ($M=$ ベクトルの次元数；$N=1$) を列ベクトルと言い，1行の行列 ($M=1$；$N=$ ベクトルの次元数) を行ベクトルという．スカラーも特殊な行列であり，これについては $M=N=1$ である．

$M\times N$ 型の行列 A にいくつかの共役演算を施すことにより新しい行列が導き出される．すなわち

i) 複素共役行列 A^*，すなわち A の要素の共役複素数を要素とする $M\times N$ 型の行列：$(A^*)_{kl}=A^*_{kl}$；

ii) 転置行列 $\tilde{A}$，すなわち行と列を取り替えることによって A から導かれる $N\times M$ 型の行列：$(\tilde{A})_{kl}=A_{lk}$；

iii) エルミート共役行列 $A^\dagger$，すなわち前記二つの操作を A に施して得られる $N\times M$ 型の行列：$(A^\dagger)_{kl}=A^*_{lk}$.

列ベクトルの複素共役は列ベクトルである．列ベクトルの転置とエルミート共役は行ベクトルであり，その反対も成り立つ．N 次正方行列の複素共役，転置，エルミート共役は N 次正方行列である．

行列を使ってつぎのような代数演算を定義する．

a) 定数 c と行列 A の乗法；積 cA は A と同じ型の行列である．

$$(cA)_{mn}=cA_{mn}.$$

b)　同じ型の二つの行列の和 $S=A+B$; S は A および B と同じ型の行列である.

$$S_{mn}=A_{mn}+B_{mn}.$$

c)　$M_A\times N_A$ 型の行列 A と $M_B\times N_B$ 型の行列 B において，A の列の数が B の行の数に等しい，つまり $N_A=M_B=K$ であるとき，A を（左から）B に掛けた積 $P=AB$ は $M_A\times N_B$ 型の行列で，その要素は

$$P_{mn}=\sum_{k=1}^{K}A_{mk}B_{kn}.$$

A を右から B に掛けた積は（それが存在するときは）B を左から A に掛けた積に等しく，BA と書かれる.

明らかに

$$(A+B)^*=A^*+B^*,\quad (\widetilde{A+B})=\tilde{A}+\tilde{B},\quad (A+B)^\dagger=A^\dagger+B^\dagger$$
$$(AB)^*=A^*B^*,\quad (\widetilde{AB})=\tilde{B}\tilde{A},\quad (AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$$

となる．最後の二つの等式において因数の順序が入れ替っていることに十分注意せよ.

N 次元の列ベクトルに N 次元の行ベクトルを左から掛けた積はスカラーである．N 次元の行ベクトルに N 次元の列ベクトルを左から掛けた積は N 次の正方行列である.

もう一つの重要な演算は二つの行列のテンソル積である．$M_1\times N_1$ 型の行列 $A^{(1)}$ と $M_2\times N_2$ 型の行列 $A^{(2)}$ から，テンソル積によって，$M_1M_2\times N_1N_2$ 型の行列 $A^{(12)}\equiv A^{(1)}\otimes A^{(2)}$ がつくられる．この行列の M_1M_2 個の行は二つの添数 m_1 と m_2 $(m_1=1,2,\cdots,M_1;m_2=1,2,\cdots,M_2)$ によって目じるしをつけられ，N_1N_2 個の列は二つの添数 n_1 と n_2 によって目じるしをつけられる．そして

$$A^{(12)}_{m_1m_2;n_1n_2}=A^{(1)}_{m_1n_1}A^{(2)}_{m_2n_2}$$

とする.

§17. 正方行列

このパラグラフでは正方行列に特有ないくつかの定義と性質を述べる.

N 次の正方行列 A においては，N 個の対角要素 A_{nn} $(n=1,2,\cdots,N)$ を，対角でない要素 A_{kl} $(k\neq l)$ と区別する．A の跡 (Trace, Spur) というのは，その対角要素の和である.

$$\mathrm{Tr}\,A\equiv\mathrm{Sp}\,A\equiv\sum_n A_{nn}. \tag{60}$$

A の行列式 $\det A$ というのは，その要素の配列から生じる行列式である.

単位行列 I というのは，対角要素がすべて１に等しく，他の要素はすべて０になる行列である．

$$I_{mn} = \delta_{mn}.$$

一つの定数と単位行列との積は定数行列であると定義する．対角（型）行列というのは，対角でない要素がすべて０の行列である．

一つの行列がその複素共役に，あるいはその転置に，あるいはそのエルミート共役に等しいとき，その行列はそれぞれ実，あるいは対称，あるいはエルミートである．

二つの N 次行列の和，積はつねに定められる．それらは N 次の行列である．加法は結合法則と交換法則を満たす．乗法は結合法則，加法に関する分配法則を満たすが，必ずしも可換ではない．N 次行列の代数は非可換代数である．

一つの N 次行列がすべての N 次行列と交換するためには，それが定数であることが必要十分である（問題４）．特に，単位行列は，任意の A に対して

$$IA = AI = A \tag{61}$$

となるような行列である．

二つの対角行列は確かに交換する．一つの N 次行列がすべての N 次対角行列と交換するためには，それが対角型であることが必要十分である（問題４）．

行列の積の跡は，これらの行列の円置換によって不変である：

$$\mathrm{Tr}\, ABC = \mathrm{Tr}\, CAB. \tag{62}$$

行列の積の行列式は，それらの行列式の積に等しい：

$$\det ABC = \det A \cdot \det B \cdot \det C. \tag{63}$$

行列 B が行列 A の逆と定義されるのは，

$$AB = I \qquad と \qquad BA = I \tag{64}$$

が成り立つときである．さらに，これらの等式のうち一つが成り立つときには，もう一つも成り立つ．このときつぎのように書く：

$$B = A^{-1}.$$

行列 A が逆をもつためには，行列式が０と異なることが必要十分である：$\det A \neq 0$．そうでない場合，行列は特異であるという．

容易に確かめられるように，

$$(\tilde{A})^{-1} = (\widetilde{A^{-1}}), \quad (A^*)^{-1} = (A^{-1})^*, \quad (A^\dagger)^{-1} = (A^{-1})^\dagger$$

であり，また

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1}.$$

行列 O の転置が O の逆に等しいとき，すなわち

$$O\tilde{O} = \tilde{O}O = I$$

のとき，Oは直交であるという．行列 U のエルミート共役が U の逆に等しいとき，すなわち

$$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I$$

のとき，U はユニタリであるという．

N 次元列ベクトルに左から N 次行列を掛けた積は N 次元列ベクトルである．N 次元行ベクトルに右から N 次行列を掛けた積は N 次元行ベクトルである．

これらのベクトルに対する対角行列の作用は特に簡単である．このような行列 D の要素を

$$D_{mn} = d_m \delta_{mn}$$

とし，列ベクトル u の成分を u_n とすれば，

$$(Du)_n = d_n u_n.$$

同様に，行ベクトル v の成分を v_n とするとき，

$$(vD)_n = v_n d_n.$$

行列 A が特異であるならば，$Au = 0$ を満たす〔0 でない〕列ベクトル u が少なくとも一つ存在し，また逆も成り立つ．

この結果から重要な定理が導かれる．

二つの N 次行列を A, B とする．このとき，

$$Au = \lambda Bu$$

を満たす（N 次元の 0 でない）列ベクトル u が存在するためには，定数 λ が方程式

$$\det(A-\lambda B) = 0$$

の解であることが必要十分である．

特に，A が N 次の行列であるとき，

$$Au = \lambda u$$

となるような〔0 でない〕列ベクトル u が存在するためには，定数 λ が方程式

$$\det(A-\lambda I) = 0$$

の解であることが必要十分である．

この代数方程式はたかだか N 次であり，**永年方程式**(*)と名づけられる．

行ベクトルについても同じような性質が得られる．

二つの行列がそれぞれ N_1 次と N_2 次であるとき，そのテンソル積は N_1N_2 次の行列

(*) ［訳注］ 数学ではふつう A の固有方程式と呼ばれる．

である．特に，単位行列 $I^{(1)}$，$I^{(2)}$ のテンソル積は N_1N_2 次元の単位行列 $I^{(12)}$ である(*).

2次の行列と2次の行列のテンソル積をつくることによって得られる4次の行列を例にとろう．つぎのような2次元の行列（パウリ行列）を導入するとつごうがよい．

$$1^{(\sigma)}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{65}$$

2次元の行列はすべてこれら4個のエルミート行列の線形結合の形に表わされる．一方，別の2次元空間の行列

$$1^{(\rho)}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \rho_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \rho_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \rho_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{66}$$

を考えよう．(ρ) 型の行列と (σ) 型の行列のテンソル積をつくることによって，4行4列の行列を得る．こうしてつくられる $(\rho\sigma)$ 型の行列の例をいくつか具体的にあげよう：

$$\rho_1\otimes\sigma_1=\begin{pmatrix}0&\sigma_1\\\sigma_1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}$$

$$\rho_1\otimes\sigma_2=\begin{pmatrix}0&\sigma_2\\\sigma_2&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}$$

$$\rho_3\otimes1^{(\sigma)}=\begin{pmatrix}1^{(\sigma)}&0\\0&-1^{(\sigma)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}+1&0&0&0\\0&+1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}.$$

これらのテンソル積行列を二つの空間の一方，たとえば (ρ) 空間の行列とみなし，その行列の各要素はもう一つの空間の行列であると考えることもできる．上の各等式の第2辺に示されているのがそれである．第3辺ではこれらの行列の具体的な表現が与えられている．各行（および各列）の目じるしを二重添数 $m_\rho m_\sigma$ によってつけることにし，初めの添数は (ρ) 空間の成分に，あとの添数は (σ) 空間の成分に関するものとすれば，行（および列）は 11，12，21，22 の順に並べられている．

テンソル積行列の線形結合によって，二重添数の正方行列

$$A\equiv(A_{m_1m_2;n_1n_2})\qquad(m_1,n_1=1,2,\cdots,N_1\,;\,m_2,n_2=1,2,\cdots,N_2)(**)$$

がつくられ，これは N_1N_2 次元である．先の例が示すように，この行列を（1）型の行列とみなし，その各要素が（2）型の行列であると考えることもできる．このような行列の対角要素の和をつくると，ふつうの意味での（2）型の行列ができる．これを，初めに考えた行列 A の空間（1）における偏跡と定義し，Tr_1A で表わす：

(*)［訳注］本書では，2次の正方行列を2次元の行列または2次元（ベクトル）空間の行列と呼ぶことがある．これは2次元空間の線形変換を表現するからである．
(**)［訳注］数 $A_{m_1m_2;n_1n_2}$ を要素とする行列を $(A_{m_1m_2;n_1n_2})$ で表わす．

$$(\mathrm{Tr}_1 A)_{m_2 n_2} \equiv \sum_{n=1}^{N_1} A_{n m_2; n n_2}. \tag{67}$$

同じように，空間（2）における偏跡も定義される．明らかに

$$\mathrm{Tr}\, A = \mathrm{Tr}_2(\mathrm{Tr}_1 A) = \mathrm{Tr}_1(\mathrm{Tr}_2 A) \tag{68}$$

であり，A がテンソル積 $A^{(1)} \otimes A^{(2)}$ に等しいときには，

$$\mathrm{Tr}(A^{(1)} \otimes A^{(2)}) = (\mathrm{Tr}_1 A^{(1)})(\mathrm{Tr}_2 A^{(2)}). \tag{69}$$

§18. 無限行列への拡張

有限行列に関する諸概念は大部分無限行列にも拡張される．その行と列に目じるしをつけるものは，一つまたは多くのとびとびの添数，あるいはまたもっと一般に，有限個または可算無限個のとびとびの値をとりうるいくつかの添数と，ある領域に含まれるすべての値をとりうる連続ないくつかの添数であってもよい．無限行列の行と列が同じ添数の系によって表わされているとき，この行列は正方行列であるという．無限行列がただ一つの列から成るときは列ベクトル，一つの行から成るときは行ベクトルと言う．

複素共役，転置，エルミート共役の演算はそのまま無限行列に拡張される．定数を掛けたり，加えたりすることについても同じことが言える．A を（左から）B に掛けることに関しては，その前提として A の列と B の行が同じ添数の系によって表わされていなければならない．さらに，いくつかの添数が連続であるときは，加法を積分に変える必要がある．具体的に考えるために，A と B が正方行列であり，その要素は区間 (q_1, q_2) 内のすべての値をとりうる連続添数 q を含むとする．積 $P = AB$ の行列要素 $P(q\,;q')$ は

$$P(q\,;q') = \int_{q_1}^{q_2} A(q\,;q'')\, B(q''\,;q')\, \mathrm{d}q''$$

である．積がはっきり定められるのは，その要素の定義式に現われる和または積分が収束するときに限る．

収束の問題をすべて別にすれば，正方行列について §17 で考えたことは無限次行列に拡張されるが，行列式の概念は例外である．詳しく述べる必要があるのは，添数が連続である場合の対角行列の定義と逆行列の存在についての条件に関することだけである．

連続な行列 $D(q\,;q')$ が<u>対角型</u>であるというのは，それが

$$D(q\,;q') = d(q)\, \delta(q-q') \tag{70}$$

という形をしているときであると定義する．ただし，$d(q)$ は添数 q の任意の関数である．こうすれば対角行列に特有な二つの性質が保たれる．すなわち二つの対角行列は交換し，

ベクトルに対する対角行列の作用は，このベクトルの各成分に対応する対角要素を掛けることになる．たとえば，(70) によって定められた対角行列が成分 $g(q)$ をもつ列ベクトル g に作用すると，ベクトル $h = Dg$ が生じ，その成分は

$$h(q) = \int D(q, q')\, g(q')\, \mathrm{d}q' = d(q)\, g(q)$$

である．連続行列 $\delta'(q-q')$ は対角型でないことに注意する．

与えられた行列の逆の存在に関しては，有限行列の場合と違って，

$$AB = I \tag{71 a}$$

であることが必ずしも

$$BA = I \tag{71 b}$$

であることを意味しない．A と B が互いに逆であると言えるためには，二つの等式 (71 a, b) が同時に満たされなければならない．

一方，A が逆をもつために，それが正方行列であることは必要でない．たとえば A の行がとびとびの添数で表わされ，列が連続な添数で表わされているときにも，A が逆をもつことがありうる．この場合，逆 A^{-1} はとびとびの列の添数と連続な行の添数をもつ．特にユニタリ行列 U，すなわち定義によれば二つの等式

$$UU^{\dagger} = I, \qquad U^{\dagger}U = I \tag{72}$$

を満たす行列において，行の添数と列の添数が必ずしも同じ性格のものでなくてもよい．しかし，二つの定義式 (72) の右辺にある単位行列は必ず正方行列である．行列 U が正方行列でないとき，これらの単位行列はそれぞれ異なる添数の系をもつ．

§19. 行列によるベクトルと演算子の表現

ベクトル空間 $\mathcal{E}$ を考え，この空間のベクトルから一つの完全直交規格化系を選ぶ．この系が，互いに交換するオブザーバブルの完全集合の固有ベクトルから成る場合もありうる．書き方を簡明にするため，この系に属するベクトルがとびとびの添数 n によって表わされている場合について論じる．たとえば，それがあるオブザーバブル Q の固有ベクトルであると仮定する：

$$Q\,|\,n\rangle = q_n\,|\,n\rangle.$$

これらは表現 $\{Q\}$ の基底ベクトルであると言う．これらのベクトルは完全直交規格化系をつくる：

$$\langle m\,|\,n\rangle = \delta_{mn} \tag{73}$$

$$P_Q \equiv \sum_n | n \rangle \langle n | = 1. \tag{74}$$

等式 (73) と (74) は表現 $\{Q\}$ の基本式である．

任意のケットベクトル $|u\rangle$ に対して，

$$| u \rangle = P_Q | u \rangle = \sum_n | n \rangle \langle n | u \rangle$$

が成り立つ．量 $u_n = \langle n | u \rangle$ を1列の行列の要素とみなし，n をその行添数とすることができる．この列ベクトルを与えると $|u\rangle$ は完全に定められる．これは表現 $\{Q\}$ において $|u\rangle$ を表わす行列である．

任意のブラベクトル $\langle v|$ に対して，

$$\langle v | = \langle v | P_Q = \sum_n \langle v | n \rangle \langle n |$$

が成り立つ．量 $\langle v | n \rangle$ は，表現 $\{Q\}$ においてケット $|v\rangle$ を表わす列ベクトルの成分 v_n の複素共役である．それらを行ベクトルの要素と考えることができる．この行ベクトルを与えると $\langle v|$ は完全に定められる．これは表現 $\{Q\}$ において $\langle v|$ を表わすベクトル(*)である．この規約により，与えられたケットに共役なブラは，このケットを表わすベクトル(*)のエルミート共役によって表わされる．

任意の線形演算子 A は，基底演算子 $|m\rangle\langle n|$ の二重級数として一意的に展開される：

$$A = P_Q A P_Q = \sum_{mn} | m \rangle \langle m | A | n \rangle \langle n |.$$

展開の係数 $A_{mn} = \langle m | A | n \rangle$ によって A は完全に定まり，これらは m を行添数とし n を列添数とする正方行列の要素とみなされる．これが表現 $\{Q\}$ において A を表わす行列である．

一方ではベクトルと演算子，他方では行列というもののあいだに一対一の対応がつけられたから，空間 $\mathcal{E}$ の演算子とベクトルに関する各演算が，それを表現する行列の言葉ではどのように翻訳されるかを調べよう．

ベクトルのあいだ，あるいは演算子のあいだの共役関係には，行列間のエルミート共役関係が対応する．ブラとケットのあいだの共役に関しては，すでにこのことを確かめてある．同様に，エルミート共役な二つの演算子 A および $A^\dagger$ を表わす行列は互いにエルミート共役である．実際，これらの要素はエルミート共役を特徴づける関係式を満たす．

$$A^\dagger_{mn} \equiv \langle m | A^\dagger | n \rangle = \langle n | A | m \rangle^* = A^*_{nm}.$$

ベクトルや演算子のあいだの種々な代数的演算については，これらを行列の言葉に翻訳

(*) ［訳注］ 行列としてのベクトルである．

すると，それぞれを表現する行列についての同じ代数的演算になる．このことを確かめるには，前の二つの節で定義された基本演算を一つ一つ吟味すればよい．

定数を掛けることと加法については，事柄は明らかである．たとえば二つの演算子の線形結合 $\lambda_1 A_1+\lambda_2 A_2$ にはいつも，それらを表わす行列の同じ線形結合が対応する．

$$\langle m|(\lambda_1 A_1+\lambda_2 A_2)|n\rangle=\lambda_1\langle m|A_1|n\rangle+\lambda_2\langle m|A_2|n\rangle.$$

同様に，ベクトルと演算子について定義された種々な積は，対応する行列の積によって表わされる．すなわち，

i) $|v\rangle$ と $|u\rangle$ の内積：

$$\langle v|u\rangle=\langle v|P_Q|u\rangle=\sum_n\langle v|n\rangle\langle n|u\rangle=\sum_n v_n^* u_n.$$

$\langle v|u\rangle$ は，$|u\rangle$ を表わす行列（列ベクトル）に $|v\rangle$ を表わす行列のエルミート共役を（左から）掛けた積に等しい．

ii) ケット $|u\rangle$ またはブラ $\langle v|$ に対する演算子 A の作用：

$$\langle n|A|u\rangle=\langle n|AP_Q|u\rangle=\sum_k\langle n|A|k\rangle\langle k|u\rangle$$

$$\langle v|A|n\rangle=\langle v|P_Q A|n\rangle=\sum_l\langle v|l\rangle\langle l|A|n\rangle.$$

$A|u\rangle$ を表わす行列（列ベクトル）は，$|u\rangle$ を表わす行列に A を表わす行列を（左から）掛けた積である．$\langle v|A$ を表わす行列（行ベクトル）は，$\langle v|$ を表わす行列に A を表わす行列を（右から）掛けた積である．

iii) 演算子 A と演算子 B の積 AB：

$$\langle m|AB|n\rangle=\langle m|AP_Q B|n\rangle=\sum_k\langle m|A|k\rangle\langle k|B|n\rangle.$$

AB を表わす行列は，B を表わす行列に A を表わす行列を（左から）掛けた積である．

iv) 演算子 $|u\rangle\langle v|$：これを表わす行列の (m,n) 要素は $\langle m|u\rangle\langle v|n\rangle$ である．したがってその結果は，$\langle v|$ を表わす行列（行ベクトル）に $|u\rangle$ を表わす行列（列ベクトル）を（左から）掛けた積になる（それによって確かに正方行列が与えられる）．

結局，われわれは空間 $\mathcal{E}$ のベクトルと演算子を行列によって表わしたが，その表現は，ベクトルと演算子に関する種々な演算と行列に関する演算とのあいだにきわめて簡単な対応の規則が成り立つようにつごうよく定義したのであった．空間 $\mathcal{E}$ のどのような幾何学的問題を取り扱うときでも，純粋に幾何学的な方法によって，そこに現われるベクトルと演算子を直接に処理することもできるし，適当な表現においてそれらを表わす行列につき代数的あるいは解析的な処理を行なうこともできる．

後者の場合，表現の選び方の巧拙によって問題の解決が簡単にも複雑にもなるが，それ

はちょうど解析幾何学において，座標をうまく選ぶかどうかにより問題の解決に難易が生じるのと同じである．実際には，問題になっているベクトルや演算子がなるべく簡単な行列によって表わされるように表現が選ばれよう．

これに関連して，オブザーバブル Q は表現 $\{Q\}$ において特に簡単な行列により表わされることに注意する．それは対角行列である．もっと一般に，任意の関数 $f(Q)$ は対角行列によって表わされる．

$$\langle m|f(Q)|n\rangle = f(q_n)\,\delta_{mn}.$$

Q と交換する演算子もまたごく簡単な行列によって表わされる．実際，$[X, Q]=0$ ならば，

$$(q_n - q_m)\langle m|X|n\rangle = 0$$

となるから，$q_m \neq q_n$ であるようなすべての対 (m, n) に対して $\langle m|X|n\rangle = 0$ である．言いかえると，Q の異なる固有値に対する行添数と列添数をもつ行列要素はすべて必ず0である（§15を参照）．

上記の考察はすべて，二つの空間 $\mathcal{E}_1$ と $\mathcal{E}_2$ とのテンソル積として生じる，任意の空間 $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ についても容易に拡張される．テンソル積によってつくられるベクトルと演算子は，空間 $\mathcal{E}_1$ および $\mathcal{E}_2$ のベクトルと演算子を表わす行列のテンソル積行列によって表わされる．

§20. 行列の変換

もう一度有限次行列を考えよう．これからは大文字によって N 次正方行列を表わし，小文字によって N 次元の（列または行）ベクトルを表わす．T を特異でない（T^{-1} が存在する）行列とする．この行列によって一つの変換を定めることができ，A の変換行列 A' は

$$A' = TAT^{-1} \tag{75}$$

によって定義される．A と A' との対応は一対一であり，A は A' から逆変換

$$A = T^{-1}A'T \tag{76}$$

によって導かれる．

このような変換は跡と行列式を変えない：

$$\mathrm{Tr}\,A = \mathrm{Tr}\,A', \qquad \det A = \det A' \tag{77}$$

（行列の積の跡と行列式の性質）．また明らかに，行列のあいだの代数的な等式もすべて保たれる．たとえば

$$A = \lambda BC + \mu DEF$$

であるとしよう．両辺に左から T を，右から T^{-1} を掛け，必要が生じるごとに式 $T^{-1}T$ を各項に挿入すれば，

$$TAT^{-1} = \lambda TBT^{-1}TCT^{-1} + \mu TDT^{-1}TET^{-1}TFT^{-1},$$

すなわち

$$A' = \lambda B'C' + \mu D'E'F'$$

となる．

また，列ベクトル $\boldsymbol{u}$ の変換 $\boldsymbol{u}'$

$$\boldsymbol{u}' = T\boldsymbol{u}, \qquad \boldsymbol{u} = T^{-1}\boldsymbol{u}' \tag{78}$$

および行ベクトル $\boldsymbol{v}$ の変換 $\boldsymbol{v}'$

$$\boldsymbol{v}' = \boldsymbol{v}T^{-1}, \qquad \boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}'T \tag{79}$$

が定義される．

容易に確かめられるように，正方行列と行または列ベクトルを含む代数方程式は，まったく一般にこの変換によって，不変に保たれる．他方，c を任意の〔0でない〕定数とするとき，Tを cT に変えても正方行列の変換は変わらない．しかし列ベクトルには c が掛けられ，行ベクトルには $1/c$ が掛けられる．

ここに述べた変換により，行列のあいだの種々な共役関係は一般に保存されない（問題5）．特に，変換がエルミート共役を保つために T がどんな条件を満たすべきかを調べよう．任意の A に対して $A' = TAT^{-1}$ が

$$A'^{\dagger} = TA^{\dagger}T^{-1}$$

を意味するためには，

$$TAT^{-1} = (TA^{\dagger}T^{-1})^{\dagger} = (T^{-1})^{\dagger}AT^{\dagger}$$

が必要であり，この第1辺と第3辺に左から $T^{\dagger}$ を，右から T を掛けると

$$T^{\dagger}TA = AT^{\dagger}T$$

となる．それゆえ，$T^{\dagger}T$ はすべての行列 A と交換しなければならないから，$T^{\dagger}T$ は単位行列のスカラー倍である．

$$T^{\dagger}T = cI.$$

さらに，任意の $\boldsymbol{u}$ に対して $\boldsymbol{u}' = T\boldsymbol{u}$ が $\boldsymbol{u}'^{\dagger} = \boldsymbol{u}^{\dagger}T^{-1}$ を意味するためには，任意の $\boldsymbol{u}$ に対して $\boldsymbol{u} = T^{\dagger}T\boldsymbol{u}$ となることが必要であり，したがって $c = 1$ である．結局，行列 T はユニタリでなければならない．明らかに，エルミート共役関係が保たれるために必要なこの条件はまた十分条件でもある．

変換の行列 U がユニタリであるとき，この変換はユニタリ変換と呼ばれる．この場合

は $U^{-1}=U^{\dagger}$ であるから，行列 A, 列ベクトル u, 行ベクトル v の変換の定義式はそれぞれ

$$\left.\begin{aligned} A' &= UAU^{\dagger}, & A &= U^{\dagger}A'U, \\ u' &= Uu, & u &= U^{\dagger}u', \\ v' &= vU^{\dagger}, & v &= v'U \end{aligned}\right\} \tag{80}$$

となる．すべての変換と同じように，ユニタリ変換は行列の跡と行列式および行列とベクトルのあいだの代数方程式を保つ．さらに，それはエルミート共役関係をも保つ．

また，つぎの二つの基本定理が成り立つが，ここでは証明なしに述べておく．

A）任意のエルミート行列 H はあるユニタリ変換によって対角型に変えられる．

$$H' = UHU^{\dagger}, \qquad H' \text{ は対角型}.$$

H' の対角要素は H の《固有値》である．それらはすべて実数であり（H' がエルミート），永年方程式

$$\det(H - xI) = 0$$

の根である．

B）二つのエルミート行列 H, K が同じ一つのユニタリ行列によって対角化されるためには，それらが交換することが必要十分である．

有限次行列に関する種々な定義や性質はすべて容易に無限行列に拡張される．逆をもつ任意の無限行列 T は正方行列あるいは（列または行）ベクトルに対して一つの変換を定める．ただし，定義式に入ってくる和または積分の収束を条件とする．有限行列に対する変換とは異なり，T が正方行列であることは必要でない．もちろん，変換しようとする（正方）行列の行と列は T の列と同じ添数の系によって表わされている．列ベクトルと行ベクトルの成分も同様である．変換された行列の行と列，および変換されたベクトルの成分を見れば，それらの添数系は T の行の添数系である．

跡（それが収束する場合）と代数方程式を保存し，ユニタリ変換の場合はエルミート共役関係をも保つ性質は，無限行列に対する変換においてもそのまま成り立つ．ユニタリ変換によるエルミート行列の対角化に関する二つの基本定理については，これらがすべてのエルミート行列に対して成り立つわけではないが，われわれが今後出会うものに対しては適用されると仮定する．

§21. 表現の変更

行列を使ってベクトル空間 $\mathcal{E}$ のベクトルと演算子を表現する問題にもどる．この空間

の基底ベクトル系のおのおのに，ある一つの表現が対応する．こうしてつくられる各表現において，同じ演算子または同じベクトルを表わす行列のあいだの関係を求めることができればつごうがよい．われわれはユニタリ変換によって一方から他方へ移ることを知るであろう．

二つの基底系を考え，具体的に述べるために，一方は §19 のオブザーバブル Q の固有ベクトル $|n\rangle$ $(n=1,2,\cdots,\infty)$ から成り，他方は別のオブザーバブル Ξ の固有ベクトル $|\xi\rangle$ から成るとし，Ξ のスペクトルは連続であると仮定する．これら二つの系は表現 $\{Q\}$ と $\{\Xi\}$ を定める．表現 $\{Q\}$ の基本式はすでに書いたとおりである（式 (73) と (74)）．表現 $\{\Xi\}$ のそれは

$$\langle\xi|\xi'\rangle=\delta(\xi-\xi') \tag{81}$$

$$P_{\Xi}\equiv\int|\xi\rangle\mathrm{d}\xi\langle\xi|=1 \tag{82}$$

である．

これらの表現の一方の基底ベクトルは他方の基底ベクトルにより級数に展開される．

$$|n\rangle=\int|\xi\rangle\mathrm{d}\xi\langle\xi|n\rangle,\qquad |\xi\rangle=\sum_n|n\rangle\langle n|\xi\rangle. \tag{83}$$

$n\rangle$ の展開に係数として現われる内積 $\langle\xi|n\rangle$ は，ξ を行添数とし n を列添数とする行列 S の要素 $S(\xi;n)$ とみなすことができ，また $|\xi\rangle$ の展開に係数として現われる内積 $\langle n|\xi\rangle$ は，n を行添数とし ξ を列添数とする行列 T の要素 $T(n;\xi)$ とみなすことができる．さらに，$\langle\xi|n\rangle=\langle n|\xi\rangle^*$ であるから，

$$T=S^{\dagger}.$$

また，
$$\sum_n\langle\xi|n\rangle\langle n|\xi'\rangle=\langle\xi|\xi'\rangle=\delta(\xi-\xi')$$

$$\int\langle n|\xi\rangle\mathrm{d}\xi\langle\xi|n'\rangle=\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'}.$$

言いかえると，

$$SS^{\dagger}=I \tag{84 a}$$

$$TT^{\dagger}=S^{\dagger}S=I. \tag{84 b}$$

行列 S はユニタリである．

さて，表現 $\{Q\}$ においてケット $|u\rangle$ を表わし，成分 $\langle 1|u\rangle,\langle 2|u\rangle,\cdots$ をもつ列ベクトルを $(u)_Q$ と書き，表現 $\{\Xi\}$ において同じケットを表わし，成分 $\langle\xi|u\rangle$ をもつ列ベクトルを $(u)_{\Xi}$ と書く．関係 (74) を使えば，

$$\langle\xi|u\rangle=\sum_k\langle\xi|k\rangle\langle k|u\rangle,$$

すなわち
$$(u)_{\Xi} = S(u)_Q. \tag{85}$$

同様に，与えられた演算子 A を表現 $\{Q\}$ および $\{\Xi\}$ において表わす行列をそれぞれ $(A)_Q$, $(A)_{\Xi}$ と書く．このとき
$$\langle \xi | A | \xi' \rangle = \sum_{kl} \langle \xi | k \rangle \langle k | A | l \rangle \langle l | \xi' \rangle,$$
すなわち
$$(A)_{\Xi} = S(A)_Q S^{\dagger}. \tag{86}$$
同様にして，同じブラ $\langle v|$ を表わす行ベクトル $(v)_Q$ と $(v)_{\Xi}$ のあいだには，
$$(v)_{\Xi} = (v)_Q S^{\dagger} \tag{87}$$
が得られよう．(85)，(86)，(87) はユニタリ変換 S に特有な変換式である（式 (80)）．

つまり，表現 $\{Q\}$ の行列から表現 $\{\Xi\}$ の行列へは，ユニタリ変換 S によって移るのである．

この行列 S の要素はつぎの注意すべき性質をもっている．

——列添数 n の関数と見れば，第 ξ 行の要素 $\langle \xi | n \rangle$ は，表現 $\{Q\}$ において Ξ の固有ブラ $\langle \xi |$ を表わす行ベクトル $(\xi)_Q$ の成分である．

——行添数 ξ の関数と見れば，第 n 列の要素 $\langle \xi | n \rangle$ は，表現 $\{\Xi\}$ において Q の固有ケット $| n \rangle$ を表わす列ベクトル $(n)_{\Xi}$ の成分である．

特に，表現 $\{Q\}$ において演算子 Ξ の固有値問題を解くことは，行列 $(\Xi)_Q$ を対角型にする変換 S を決めることと数学的に同値な問題である．同じように，表現 $\{\Xi\}$ において演算子 Q の固有値問題を解くことは，行列 $(Q)_{\Xi}$ を対角型にする変換 $S^{\dagger}$ を決めるという問題と同値である．

すべての表現と無関係に定められる量や関係を認識することは重要である．ベクトルと演算子を用いて直接に定められる量や関係はいずれも明らかにこの性質をもつ．たとえば二つのベクトルの内積は表現の変更によって変わらない量である．ベクトルのあいだおよび演算子のあいだのエルミート共役関係，代数方程式もまたこの不変性をもつ．

さらに跡の保存に注意しよう．一つの演算子を表わす行列の跡は（それが収束するとき）どんな表現を用いても同じ値を保つ．これは演算子そのものに固有な量である．特に，
$$\mathrm{Tr}\, | u \rangle \langle u | = \langle u | u \rangle \tag{88}$$
$$\mathrm{Tr}\, | u \rangle \langle v | = \langle v | u \rangle \tag{89}$$
を示すことは容易である（問題 6）．

§22. 演算子とベクトルのユニタリ変換

§21に出てきた行列 S は演算子を表わすものではない．演算子を表わす行列は一つの

与えられた表現において定まるものであるが，変換の行列はいわば二つの表現にまたがるものである．先に調べた特殊な例については，行列 S が正方行列でないから，このことはとりわけ明瞭である．

それにもかかわらず，特殊であるが重要な場合として，第一の表現の基底ベクトルと第二のそれとのあいだに一対一の対応がつけられるということがありうる．この場合には，二つの基底系のベクトルに同じ一組の添数によって目じるしをつける．話を具体的にするため，表現 $\{Q\}$ と $\{\bar{Q}\}$ を考え，$\{Q\}$ の基底ベクトル $|n\rangle$ にはとびとびの添数 n をつけ，$\{\bar{Q}\}$ の基底ベクトル $|\bar{n}\rangle$ にも同じ添数をつける．同じ添数をつけられた二つのケット $|n\rangle, |\bar{n}\rangle$ が互いに対応する．この対応によって定められる線形演算子を U とする．

$$|n\rangle = U|\bar{n}\rangle.$$

さらに

$$U = U(\sum_n |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}|) = \sum_n |n\rangle\langle\bar{n}| \tag{90}$$

が成り立ち，

$$U^\dagger = \sum_n |\bar{n}\rangle\langle n|$$

であるから，$|n\rangle$ と $|\bar{n}\rangle$ の直交規格化関係を考慮に入れると，

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1 \tag{91}$$

となる．したがって U はユニタリ演算子である．さらに，$\{Q\}$ から $\{\bar{Q}\}$ への表現の変更を定めるユニタリ行列 $\langle\bar{m}|n\rangle$ は，表現 $\{\bar{Q}\}$ において U を表わす行列である．

ユニタリ演算子 U をつくることができる場合には，表現を変えるときの取り扱いといわば相補的な取り扱いを定めることができる．基底系 $\{Q\}$ を新しい基底系 $\{\bar{Q}\}$ に変換すると，$\{\bar{Q}\}$ の基底ベクトルは式

$$|\bar{n}\rangle = U^\dagger|n\rangle \tag{92}$$

によって与えられる．この変換の代りに，空間 $\mathcal{E}$ のベクトルと演算子そのものの変換を行ない，各ベクトル $|u\rangle$ にベクトル $|\hat{u}\rangle = U|u\rangle$ を，各演算子 A に演算子 $\hat{A} = UAU^\dagger$ を対応させることもできる．

U がユニタリであることを考慮に入れると，明らかに変換 U はベクトルと演算子のあいだの共役関係および方程式を保つ．特に，

i)　内積が保存される：$\langle\hat{u}|\hat{A}|\hat{v}\rangle = \langle u|A|v\rangle$.

ii)　エルミート性が保存される．

さらに，A がオブザーバブルならば，その変換 $\hat{A}$ もオブザーバブルであり，同じ固有値のスペクトルをもつ．A の固有値の方程式

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

が，方程式

$$\hat{A}|\hat{a}\rangle = a|\hat{a}\rangle$$

に変換されるからである．与えられた固有値 a に対応する $\hat{A}$ の固有ケットは，同じ固有値に対応する A の固有ケットの変換である．表現 $\{Q\}$ において $\hat{A}$ を表わす行列は表現 $\{\bar{Q}\}$ において A を表わす行列と同じであることに注意する．同様に，$\{Q\}$ における $|\hat{a}\rangle$ の成分と $\{\bar{Q}\}$ における $|a\rangle$ の成分は同じである．

それぞれ演算子 U と V によって定められた二つの変換をつづけて行なうことは，演算子 $W=VU$ によって定められた変換を行なうことと同値である．〔U, V がユニタリならば〕W はユニタリであるから，これによって生じる変換もユニタリである．言いかえると，二つのユニタリ変換の積はユニタリ変換である．

ユニタリ変換を定める演算子 U が限りなく1に近いとき，この変換は無限小であるという．U は

$$U = 1+\mathrm{i}\varepsilon F \tag{93}$$

という形をとり，ε は無限小の実数である．ユニタリ性の条件 (91) は，

$$(1-\mathrm{i}\varepsilon F^\dagger)(1+\mathrm{i}\varepsilon F) = (1+\mathrm{i}\varepsilon F)(1-\mathrm{i}\varepsilon F^\dagger) = 1$$

と書かれ，ε に対して1位の項だけを残すと

$$F = F^\dagger.$$

つまり，演算子 F はエルミートである．

このような無限小変換において，変換されたベクトルと演算子はつぎの式で与えられる．

$$|\hat{u}\rangle \equiv |u\rangle + \delta|u\rangle = (1+\mathrm{i}\varepsilon F)|u\rangle$$
$$\hat{A} \equiv A+\delta A = (1+\mathrm{i}\varepsilon F)A(1-\mathrm{i}\varepsilon F) = A+\mathrm{i}\varepsilon[F, A].$$

すなわち

$$\delta|u\rangle = \mathrm{i}\varepsilon F|u\rangle \tag{94}$$
$$\delta A = \mathrm{i}\varepsilon[F, A]. \tag{95}$$

演 習 と 問 題

1. 二つの射影子 P_i, P_j が与えられたとき，$P_iP_j = P_i$ が成り立つ場合に，P_i は P_j より小さいかまたは等しいと定義し，$P_i \leqslant P_j$ と書く．$P_i \leqslant P_j$ ならば，任意の $|u\rangle$ に対して必ず $\langle u|P_i|u\rangle \leqslant \langle u|P_j|u\rangle$ であり，逆も正しい．このことを示せ．直接に，あるいは今述べた結果を使って，このように定義された大小関係が，大小関係に特有なつ

ぎの公理を確かに満たすことを示せ.

i) $P_i \leqslant P_j$ で $P_j \leqslant P_i$ ならば $P_i = P_j$,

ii) $P_i \leqslant P_j$ で $P_j \leqslant P_k$ ならば $P_i \leqslant P_k$.

2. $P_1, P_2, \cdots, P_K$ を射影子とする. これらの和がまた射影子になるのは, ヒルベルト空間に属する任意のベクトル $|u\rangle$ に対して

$$\sum_{i=1}^{K} \langle u | P_i | u \rangle \leqslant \langle u | u \rangle$$

であるときに限ることを示せ.

3. i) オブザーバブル A が有限個数 N の固有値をもつとする. これらの固有値を $a_1, a_2, \cdots, a_N$ で表わし,

$$f(A) \equiv (A-a_1)(A-a_2)\cdots(A-a_N) \equiv (A-a_n)\, g_n(A)$$

と置く. $f(A) = 0$ であり, n 番目の固有値の部分空間への射影子 P_n はつぎの式で与えられることを示せ.

$$P_n = \frac{g_n(A)}{g_n(a_n)}.$$

ii) 上の逆の性質を示せ. すなわち A がエルミート演算子で N 次の代数方程式

$$f(A) \equiv (A-a_1)(A-a_2)\cdots(A-a_N) = 0$$

を満足し, 次数が N より低いこれ以外の代数方程式を満足することがないならば, これは N 個の固有値をもつオブザーバブルである. 固有値は方程式 $f(x) = 0$ の N 個の根で与えられ, 必然的に実数でかつ互いに異なる.

4. ある N 次行列が

i) すべての N 次行列と交換するならば, この行列は必ず定数である.

ii) すべての N 次対角行列と交換するならば, この行列は必ず対角型である.

このことを示せ.

5. つぎのことを示せ.

a) ある変換が行列のあいだの複素共役関係を保存するためには, 変換の行列が実であることが必要十分である.

b) ある変換が行列のあいだの転置関係を保存するためには, 変換の行列が直交行列であることが必要十分である.

6. $|u\rangle$, $|v\rangle$ をノルム有限な二つのベクトルとする.

$$\mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle u| = \langle u | u \rangle, \qquad \mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle v| = \langle v | u \rangle$$

であることを示せ.

7. H を正の定符号のエルミート演算子とする. 任意の $|u\rangle$, $|v\rangle$ に対して

$$|\langle u | H | v \rangle|^2 \leqslant \langle u | H | u \rangle \langle v | H | v \rangle$$

であり, 等式 $\langle u | H | u \rangle = 0$ から必ず $H|u\rangle = 0$ が導かれることを示せ. さらに, $\mathrm{Tr}\,H \geqslant 0$ であり, この等号の成り立つのは $H = 0$ のときだけであることを示せ.

8. H と K が二つとも正の定符号のオブザーバブルならば，$\mathrm{Tr}\,HK \geqslant 0$ であり，この等号は $HK = 0$ を意味することを示せ.

9. A を任意の線形演算子とする．$A^{\dagger}A$ は正の定符号のエルミート演算子であり，その跡は，任意に選ばれた表現において A を表わす行列の要素の絶対値の二乗の和に等しいことを示せ．このことから，$\mathrm{Tr}\,A^{\dagger}A \geqslant 0$ であることおよび $\mathrm{Tr}\,A^{\dagger}A = 0$ となるのは $A = 0$ のときに限ることを導け.

第8章　量子論の形式的一般論
B. 物理的現象の記述

§1. 序　　説

古典物理学では，与えられた系の力学的状態が各瞬間において定められるのは，この系に結びついた量すなわち力学変数全体のとる値がこの瞬間において知られるときである．これらの値を無限に詳しく，すべて同時に決定することが原理的には可能である．古典論の目標はこれらの力学変数を数えあげ，さらにこれらの変化の方程式を発見し研究することにある．

量子論では，力学的状態と力学変数のあいだの関係がはるかに間接的である．与えられた力学変数を測定する操作のあいだに，測定が行なわれている系の力学的状態は，測定装置の介入によって一般に変形を受ける．この変形は，古典物理学ではふつう無視されるが，微視的なスケールでは無視できなくなる．これは予見も制御もできない系の乱れとして現われ，力学変数をすべて同時に測るとき到達しうる精度に一つの限界を置く．こうして，一つの系に結びついたいろいろの量はすべて各瞬間にはっきり決まった値をとる，という古典物理学の基本的要請が捨てられる．われわれはただこれらの変数の一つ一つに対して値の統計的分布を定めることができるだけであり，この分布によって，たまたまこのような測定が行なわれる場合の測定結果の確率法則が与えられる．慣用の術語（第4章，§17）によれば，量子系の力学変数のすべてが互いに共立であるとは限らない．それにもかかわらず，この系の各力学変数にいくつかの変数をつけ加え，その結果共立する変数の完全集合をつくることがいつでもできるということを承認する．定義によれば，このような集合に属する変数はすべて互いに共立であり，これらの変数自身の関数を除けば，これらの各変数と共立する他の変数は存在しない．完全集合に属する各変数値の正確な決定は，量子系の力学的状態についてわれわれが獲得できる最大限の情報を与える．それゆえ，量子系の力学的状態を定めるのは，もはや古典論のように，系に結びついたすべての力学変数の値を正確に与えることではない．共立する変数の完全集合はいく組かつくられるが，そのうちの一組に現われる変数を選んでその値を与えることによって状態が定まる．

われわれは，量子系の力学的状態は線形に重ね合わされるという原理を設ける．この原理にしたがって（第7章 §1を参照），このような系にあるベクトル空間 $\mathcal{E}$ を結びつけ，

この系の力学的状態の一つ一つがこの空間のベクトルによって表わされるようにすることができる．さらに，$\mathcal{E}$ はヒルベルト空間であると仮定する．今後はいつも第7章で述べたようなヒルベルト空間のいろいろな概念と性質を利用する．そうすると，力学的状態の一つ一つに空間 $\mathcal{E}$ のあるケット $|u\rangle$ が対応する[1]．また，各力学変数には空間 $\mathcal{E}$ のオブザーバブルが一つ結びつけられる．二つの変数が共立であるかないかによって，対応するオブザーバブルは交換するかあるいは交換しない．

量子論の一般的な形式論の基礎は，一方において力学的状態と物理量を，他方においてベクトルと演算子を考え，双方のあいだに対応をつけることにある．第I節でわれわれはこの対応を詳しく定義し，実際にはどのようにしてヒルベルト空間 $\mathcal{E}$ を構成するか，またそのベクトルと演算子にはどのような物理的意味を与えるかを示そう．第II節では，運動の方程式を与えることによって，この一般的な理論の構図を完成する．第III節では，行列によって空間 $\mathcal{E}$ のベクトルと演算子を表現する仕方の数だけ，この理論を定式化する仕方が存在することを示す．波動力学はこの特殊な定式化のうちの一つである．量子系の力学的状態が完全には知られていないときは，統計学の普通の方法にしたがって，ベクトルの統計的混合により状態を表わすこともできる．これと同値な処理法は，密度演算子という特殊な型の演算子によってこの状態を表わすことである．密度演算子の形式論は本章の終りの第IV節で説明する．

I．力学的状態と物理量

§2. 確率の定義．測定に関する要請

力学的状態の一つ一つに対応して，この系に結びついた各力学変数の値に関してある統計的分布が定まる．これらの確率を定義するのには，つぎの基本要請を根拠とする．

与えられた物理量 A の任意の関数 $F(A)$ の平均値は

$$\boxed{\langle F(A)\rangle = \langle u|F(A)|u\rangle} \qquad (1)$$

である．この式のなかで，ケット $|u\rangle$ は系の力学的状態を表わし，オブザーバブル A は問題の物理量を表わす．

---

(1) 空間 $\mathcal{E}$ が量子論において演じる役割は，古典理論における位相空間の役割に似ている．位相空間の各点は一つの古典力学的状態を表わす．同様に空間 $\mathcal{E}$ の各ベクトルは量子力学的状態を表わす．しかし後者の場合，空間 $\mathcal{E}$ の二つのベクトルが互いに他の何倍かになっているとき同じ状態を表わすから，対応は一対一ではない．あとの §2 を参照．

特に，A の統計的分布の特性関数 $f(\xi)$ は関数 $e^{i\xi A}$ の平均値である：

$$f(\xi)=\langle u|e^{i\xi A}|u\rangle. \tag{2}$$

統計的分布はその特性関数を与えることにより完全に決められるから，上に述べた基本要請によってこの系のすべての力学変数の統計的分布は完全に決定される．

力学的状態とケットベクトルとのあいだの対応関係にこの要請がどのような影響をおよぼすかを調べよう．どんな演算子 $F(A)$ についても，ベクトル $|u\rangle$ に任意の位相因子 $e^{i\alpha}$（α は任意の実数）を掛けるとき，(1) はもとのままである．したがって位相因子だけしか異ならない二つのベクトルに対する統計的分布は厳密に同じである．このような二つのベクトルは同じ力学的状態を表わす．言いかえれば，各力学的状態には，位相因子を除いて定まったベクトルが対応する．他方，$f(0)=1$（1の平均値は1に等しい！）でなければならないから，ベクトル $|u\rangle$ は1に規格化されている必要がある．すなわち

$$\langle u|u\rangle=1. \tag{3}$$

この条件 (3) をはずす方がつごうのよい場合もある．そのためには，平均値の定義 (1) をもっと一般的な定義

$$\langle F(A)\rangle=\frac{\langle u|F(A)|u\rangle}{\langle u|u\rangle} \tag{4}$$

に置き換える．この定義によれば，互いに何倍かになっている二つのベクトルは同じ力学的状態を表わす（ここで問題になっているベクトルは有限なノルムをもつものとする）．

A の統計的分布を具体的に求めるためには，A が対角型になるような表現をとり，特性関数 $f(\xi)$ の式 (2)（$|u\rangle$ が1に規格化されていないときは (4)）を計算する．いくつかの細かい用語を除けば，この方法はすでに第5章で説明されている．それをここでは繰り返さない．結果を述べるだけにしておく[2]．

1° 量 A がとりうる正確な値は，それに結びついたオブザーバブルの固有値のスペクトルに属する値だけである．

2° A のスペクトルの内で（部分）領域 D のなかにある固有値に対応する A の固有ベクトルによって張られる部分空間を $\mathcal{E}_D$ とする．$\mathcal{E}_D$ へのケット $|u\rangle$ の射影を $|u_D\rangle\equiv P_D|u\rangle$ によって表わす．A を測定した結果が領域 D に属する確率 w_D は

$$\boxed{w_D=\langle P_D\rangle=\frac{\langle u_D|u_D\rangle}{\langle u|u\rangle}} \tag{5}$$

---

[2] 量子論に関するいくつかの解説書では，以下に述べる二つの性質をそれぞれ量子化の原理およびスペクトル分解の原理と名づけている．

である[3].

第5章（問題1）の研究ではいくつかの特殊な場合を取り扱ったが，そこで得た結果はすべて関係式（5）に要約される．実際，D として単にとびとびのスペクトルに属する一つの値をとることもでき，この場合関係式（5）は第5章（21）と同じである．しかし D は，とびとびの固有ベクトルをいくつか集めたもの，または連続スペクトルの一部分，あるいは両者を合わせたものからできていてもよい．特に第5章§10の終りにある例のように，D が連続スペクトルの無限小部分 $(a(\nu), a(\nu+\mathrm{d}\nu))$ であるとき，$w_D = \varpi(\nu)\mathrm{d}\nu$ となり，関係式（5）によって確率密度 $\varpi(\nu)$ を計算すると，第5章（44）による値と確かに一致する．

つぎに残されているのは，測定が終ったときの力学的状態を定めることである．この問題に対する答は，どのような個別的条件の下に測定が行なわれたかによって違ってくる．簡単なのは理想測定の場合だけである（第5章§13を参照）．理想測定の仮定の下に，この系になされた観測により，系が上に定義した領域 D に属する A の固有状態にあることが示されるならば，測定後の力学的状態は空間 $\mathcal{E}_D$ へのベクトル $|u\rangle$ の射影によって表わされる．言いかえると，測定の経過を通じて状態ベクトルの受ける（非因果律的）変化はつぎの図式に対応する．

$$|u\rangle \longrightarrow \text{結果 } D \text{ を与える理想測定} \longrightarrow P_D|u\rangle$$

波束の収縮に関するこの要請によって，理想測定を正しく定義すると考えることができる．

力学的状態を表わすのに，いつでもノルム1のベクトルを使うことにすれば——このとき $|u\rangle$ はノルム1のベクトルと考えられる——測定後の系の状態ベクトルは $P_D|u\rangle$ に一つの規格化因数を掛けたものであり，その因数は位相を除いて定まり，その絶対値の二乗は $1/w_D$ すなわちまた $1/\langle u|P_D|u\rangle$ に等しい．

§3. 量子系のオブザーバブルとそれらの交換関係

一つの量子系を調べる第一歩は，この系の力学変数を数えあげ，それらを表現するオブザーバブルの代数を定めることである．実際には，いろいろなオブザーバブルがいくつかの《基本オブザーバブル》の関数として表わされる．これらの基本オブザーバブルの交換

(3)　w_D は射影子 P_D の平均値である．P_D は A の関数であり，$\mathcal{E}_D$ のなかにある A の固有ベクトルに対してはつねに 1，$\mathcal{E}_D$ に垂直な A の固有ベクトルに対してはつねに 0 に等しい．

関係を与えれば，オブザーバブルの代数は定められたことになる．

問題の量子系が古典的類似をもつときには——今までわれわれが取り扱ったものはすべてこのような場合であるが——対応原理に基づいてきわめて一般的な規則をつくることができる．

N 次元の古典系において最も一般的な力学変数は $2N$ 個の独立変数すなわち N 個の座標 $q_1, q_2, \cdots, q_N$ と N 個の運動量 $p_1, p_2, \cdots, p_N$ の関数である．われわれは対応する量子系に同じ力学変数を結びつける．したがって位置変数を N 個，運動量の変数を N 個導入する．これらの変数にはオブザーバブルが対応するが，これらを力学変数そのものと同じ記号 $q_1, \cdots, q_N, p_1, \cdots, p_N$ によって表わそう．さらに，交換しないオブザーバブルは，各座標とそれに共役な運動量を結びつけてつくられる N 個の対(つい)だけであり，この対に対しては $[q_r, p_r] = i\hbar$ が成り立つことを要請する．言いかえれば，

$$[q_r, q_s] = 0, \qquad [p_r, p_s] = 0 \tag{6}$$

$$[q_r, p_s] = i\hbar\,\delta_{rs} \tag{7}$$

$$(r, s = 1, 2, \cdots, N).$$

最も一般的なオブザーバブルは q と p の関数であるから，どんな二つのオブザーバブルの交換子も基本交換子（6）と（7）を与えることによって一義的に定まる．さらに交換子の代数法則（第5章，§17）を用いれば，これを具体的に計算することができる．量子系のオブザーバブルと類似の古典系の量とのあいだのこのような対応については，すでに繰り返し解説した（第2章，§15と第5章，§3）．あいまいさをすべて除くためには，いつでも配置空間におけるデカルト座標から出発し，第2章 §15 の経験法則にしたがうことにする．特にそこで述べた《対称化》の規則は，系に結びついたすべての実の量にはエルミート演算子が対応することを保証する．

すべての量子系をこの対応の方法で取り扱うことができるというわけではない．適当な類似の古典系との対応によって導入された力学変数が，調べたい量子系の物理的性質を十分に表わしつくせないということもしばしば起こる．そのときは補助的な変数を導入することが必要になる．このような新しい変数とそれに関連する交換関係の選び方は純粋に直観の問題である．

一つの量子系に結びついた物理量のうち，特に注意しなければならないのはそのエネルギーである．これを表わすオブザーバブル H は系のハミルトニアンと呼ばれる．系が古典類似をもつときには，H は古典力学におけるハミルトン関数から対応によって導き出される．

§4. ハイゼンベルクの不確定性関係

ハイゼンベルクによる位置－運動量の不確定性関係は交換関係（7）からただちに導かれる.

事実，ごく一般に，二つのオブザーバブル A, B が等式

$$[A,B]=\mathrm{i}\hbar \tag{8}$$

を満たすならば，それらの標準偏差の積はつねに $\hbar/2$ より大きいかまたは等しい：

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqslant\frac{1}{2}\hbar. \tag{9}$$

これから述べる証明は第4章 §8 の証明と本質的には同じである.

定義から

$$\Delta A=(\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2)^{\frac{1}{2}},\qquad \Delta B=(\langle B^2\rangle-\langle B\rangle^2)^{\frac{1}{2}}.$$

オブザーバブル

$$\hat{A}=A-\langle A\rangle,\qquad \hat{B}=B-\langle B\rangle$$

を導入しよう．明らかに

$$[\hat{A},\hat{B}]=\mathrm{i}\hbar$$

であり，また

$$\Delta A=\Delta\hat{A}=\langle\hat{A}^2\rangle^{\frac{1}{2}},\qquad \Delta B=\Delta\hat{B}=\langle\hat{B}^2\rangle^{\frac{1}{2}}.$$

系の力学的状態が1に規格化されたケット $|u\rangle$ で表わされると考え，ベクトル $\hat{A}|u\rangle$ と $\hat{B}|u\rangle$ にシュワルツの不等式を適用すると

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2\equiv\langle u|\hat{A}^2|u\rangle\langle u|\hat{B}^2|u\rangle\geqslant|\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle|^2.$$

$\hat{A}\hat{B}$ をエルミートの部分と反エルミートの部分に分けると（第7章（29）を参照）

$$\hat{A}\hat{B}=\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}+\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2}=\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}+\mathrm{i}\,\frac{\hbar}{2}.$$

これにより $\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle$ が実部と虚部に分けられる：

$$\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle=\left\langle\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}\right\rangle+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}.$$

そこでシュワルツの不等式を書き直すと

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2\geqslant\left\langle\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}\right\rangle^2+\frac{\hbar^2}{4}$$

であるから，なおさら

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqslant\frac{1}{2}\hbar.$$

（証明終）

積 $\Delta A\cdot\Delta B$ が最小値 $\hbar/2$ に等しくなるためには，一方ではシュワルツの不等式におい

て等号が成り立つこと，したがって $\hat{A}|u\rangle = c\hat{B}|u\rangle$ （c は任意の定数）が必要であり，他方では $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ の平均値が0になること，したがって

$$\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle+\langle u|\hat{B}\hat{A}|u\rangle=(c^*+c)\langle u|\hat{B}^2|u\rangle=0,$$

すなわち $\mathrm{Re}\, c=0$ が必要である．要約すると，不等式（9）において等号が成り立つためには，$|u\rangle$ が方程式

$$(A-\alpha)|u\rangle=\mathrm{i}\gamma(B-\beta)|u\rangle \tag{10}$$

を満たすことが必要十分である．ただし α, β, γ は任意の実定数とする．

この一般的な結果を前節の位置－運動量の組（q_r, p_r）に適用すると，不確定性関係

$$\Delta q_r\cdot\Delta p_r\geqslant\frac{1}{2}\hbar \qquad (r=1,2,\cdots,N) \tag{11}$$

が得られ，等号が実際に成り立つのは，$|u\rangle$ が方程式

$$(p_r-\mathrm{i}\gamma q_r)|u\rangle=(\alpha-\mathrm{i}\gamma\beta)|u\rangle$$

の解となる場合である（α, β, γ は任意の実定数）．

§5．状態の定義と空間 $\mathcal{E}$ の構成

われわれの量子系のオブザーバブルを数え上げ，それらの交換関係を決めたならば，生じうるいろいろな量子的状態を正確に定めなければならない．すなわちこれらのオブザーバブルが作用するヒルベルト空間 $\mathcal{E}$ を構成しなければならない．そのためには，この空間の基底ベクトル系を与え，ついでこの基底ベクトルに対する各オブザーバブルの作用によってオブザーバブルを定めればよい．もちろん，この仕方で物理量を表わすように定められた演算子が，すべて実際にオブザーバブルであり，これらのオブザーバブルの代数法則が実際に守られていることを確かめなければならない．

基底系を定めるために，オブザーバブルの全体から，交換するオブザーバブルの完全集合 $A, B, C, \cdots$ を取り出す．これらが表わす力学変数を同時に測った値はこの系の状態について得られる最大限の情報を与え，その結果としてこの系の力学的状態の一つを完全に定める．したがってこれらのオブザーバブルの固有値 $a, b, c, \cdots$ の一組は，定数を除いて $\mathcal{E}$ のベクトルを一つ定める．この定数を任意に固定すれば，ある代表ベクトル $|abc\cdots\rangle$ が得られる．各固有値 $a, b, c, \cdots$ がそれぞれ $A, B, C, \cdots$ のスペクトルの範囲を余すところなく動くときに得られるベクトル $|abc\cdots\rangle$ の全体は，空間 $\mathcal{E}$ の完全直交系をつくる．さらに適当な方法でベクトル $|abc\cdots\rangle$ の規格化——ノルム有限のベクトルはすべて1に規格化し，ノルム無限大のベクトルはディラックの δ 関数によって規格化する——を定めると，これは $\mathcal{E}$ の完全直交規格化系になる．それゆえ，オブザーバブル $A, B, C, \cdots$ のスペクトルをそれぞれ与えることによって，$\mathcal{E}$ の基底系が得られる．

これらのベクトルの一つ一つに対する基底オブザーバブル $A, B, C, \cdots$ の作用は自動的に決められる．それゆえ，物理量を表わしうる他のいろいろなオブザーバブルの作用を決めることが残されている．

交換関係を考慮するだけで一般につぎのことができる(*).

i) $A, B, C, \cdots$ の全体は交換するオブザーバブルの完全集合をつくることを確かめる．

ii) これらのスペクトルをそれぞれ決定する．

iii) これらの基底系に属するベクトルに対して，他のオブザーバブルの作用を決める．

言いかえると，この系のオブザーバブルの代数に関する知識さえあれば，それらが作用する空間 $\mathcal{E}$ はほとんどつねに一義的に定められる(4).

さらに残されているのは，このように定められた構造の内部的な一貫性，すなわち物理量を表わす演算子が実際にオブザーバブルであることの確認である．

ここまでくれば，理論はすでに実験との比較に任せられるということに注意しよう．原則として，物理量は十分に精密な測定操作によって定義され，そのスペクトルは実験から直接に得られるものである．必要なことは，理論的スペクトルすなわち各物理量に対応するオブザーバブルの固有値のスペクトルがこの実験的スペクトルと一致することである．

§6. 古典類似系をもつ1次元量子系

古典類似系をもつ1次元の量子系に §5 の構成法を適用する．そのオブザーバブルはそのうちの二つすなわち p と q の関数であり，p と q は交換関係

$$[q, p] = \mathrm{i}\hbar \tag{12}$$

によって結びつけられる．

位置 q はそれだけで交換するオブザーバブルの完全集合をつくる．実際，p と q の関数 $A(q, p)$ が与えられたとき，q と A の交換子は（第5章 (68)）

$$[q, A] = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial A}{\partial p} \tag{13}$$

であり，q が A と交換するのは，A が p に関係しないときだけである．つまり q と交換するオブザーバブルは q の関数だけである．

(*) ［訳注］ これだけではわかりにくいが，のちに実例が出てくるので，それによって理解されよう．

(4) このことが厳密に言えるのは，$\mathcal{E}$ がこれらのオブザーバブルに関して既約になっている場合だけである．ここではこの条件を記憶にとどめるよう指摘するだけとし，今後のあらゆる議論においては，この条件をつねに前提とする．われわれは第15章 §6 において，既約性の概念とその物理的意味を正確に述べ，さらに徹底的に論じる．

内部的な一貫性についての簡単な考察により，q の固有関数と固有値のスペクトルにきわめて強い条件が与えられる．実際 $|q_0\rangle$ を q の固有ケットとする．すなわち

$$q\,|q_0\rangle = q_0\,|q_0\rangle.$$

二つの等しい演算子 $[q, p]$ と $\mathrm{i}\hbar$ の $|q_0\rangle$ に対応する対角要素を等しいと置けば，

$$\mathrm{i}\hbar\langle q_0|q_0\rangle = \langle q_0|qp|q_0\rangle - \langle q_0|pq|q_0\rangle.$$

$|q_0\rangle$ は確かに有限なノルムをもたない．もつとすれば右辺は恒等的に 0 となるのに，左辺は有限であるが 0 でないからである(*).

また一方で演算子

$$S(\xi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\xi/\hbar} \tag{14}$$

を考えよう．これはオブザーバブル p の関数で，パラメータ ξ を含む．明らかにこれはユニタリ演算子である．すなわち

$$S^{\dagger}S = SS^{\dagger} = 1.$$

なぜなら，そのエルミート共役は

$$S^{\dagger}(\xi) = S(-\xi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}p\xi/\hbar}$$

となるからである(**). (13) を適用すれば，

$$[q, S] = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial S}{\partial p} = \xi S$$

となる．言いかえれば

$$qS = S(q+\xi). \tag{15}$$

したがって

$$qS\,|q_0\rangle = S(q+\xi)\,|q_0\rangle = (q_0+\xi)\,S\,|q_0\rangle. \tag{16}$$

それゆえ，$S|q_0\rangle$ は q の固有ベクトルで，固有値 $(q_0+\xi)$ に対応する．このベクトルは確かに 0 でない (0 とすれば S の逆がなくなる)．実際，その（無限大の）ノルムは $|q_0\rangle$ のノルムと同じである．なぜなら，S がユニタリであるから

(*) [訳注] $\langle q_0|q = q_0\langle q_0|$ で (215 頁参照)，q_0 はただの数であるから $\langle q_0|qp|q_0\rangle = q_0\langle q_0|p|q_0\rangle$. また $q|q_0\rangle = q_0|q_0\rangle$ であるから，$\langle q_0|pq|q_0\rangle = q_0\langle q_0|p|q_0\rangle$. したがって右辺は恒等的に 0 となる．$|q_0\rangle$ は実は $\delta(q-q_0)$ と表わされるものである (153 頁参照).

(**) [訳注] 状態ベクトルを表わすのに，q の関数としての波動関数でなく，そのフーリエ変換 (99 頁参照) を用いることにしよう．そうすると p はただの数であるから考えやすい．この表現で第 7 章 (20) (213 頁) を書けば

$$\int t^*(p)\,A^{\dagger}u(p)\,\mathrm{d}p = \left(\int u^*(p)\,A\,t(p)\,\mathrm{d}p\right)^*$$

となるから，$A = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\xi/\hbar}$ ならばそのエルミート共役が $A^{\dagger} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}p\xi/\hbar}$ になることはすぐわかる．

$$\langle q_0 | S^\dagger S | q_0 \rangle = \langle q_0 | q_0 \rangle.$$

ξ が区間 $(-\infty, +\infty)$ のなかのどんな値をとっても，このような取り扱いがなされる．こうして，適当なユニタリ変換を $|q_0\rangle$ に施すことにより，区間 $(-\infty, +\infty)$ のなかに前もって定められた任意の値に対応する q の固有ケットをつくることができる．

結論として，q のスペクトルは必ず連続であり，縮退がなく，$-\infty$ から $+\infty$ までひろがっている．その固有ベクトルは必ず無限大のノルムをもつ．

固有値 q' に対応する q の固有ケットを $|q'\rangle$ で表わす：

$$q|q'\rangle = q'|q'\rangle.$$

$|q'\rangle$ は一つの定数を除いて定まるから，その定数の絶対値を規格化条件

$$\langle q' | q'' \rangle = \delta(q'-q'') \tag{17}$$

によって固定する．ベクトル $|q'\rangle$ の線形重ね合わせの全体から成る空間を空間 $\mathcal{E}$ と定義する．

q は明らかにこの空間のオブザーバブルである．さらにベクトル $|q'\rangle$ は，$\mathcal{E}$ のベクトルと演算子のある一つの表現，すなわち表現 $\{q\}$ の基底ベクトルであり，この表現において q は対角型である：

$$\langle q' | q | q'' \rangle = q'\,\delta(q'-q''). \tag{18}$$

p が空間 $\mathcal{E}$ においてはっきり定義されたエルミート演算子であることを示そう．そのためには表現 $\{q\}$ における p の行列を定めればよい．

まず (14) によって定義されたユニタリ演算子 $S(\xi)$ を考える．この演算子は (15) を満たすから，$S(\xi)|q'\rangle$ は q の固有ベクトルで固有値 $(q'+\xi)$ に対応する．すなわち

$$S(\xi)|q'\rangle = c\,|q'+\xi\rangle$$

であり，c は ξ と q' によって決まる位相因子である(5)．われわれは

$$|q'\rangle = S(q')|0\rangle$$

となるように基底ベクトルの位相を選ぶことができる．こうすれば，ξ と q' が何であっても位相因子 c は1に等しい．実際，

$$\begin{aligned} S(\xi)|q'\rangle &= S(\xi)\,S(q')|0\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\xi/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pq'/\hbar}|0\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p(\xi+q')/\hbar}|0\rangle \\ &= S(q'+\xi)|0\rangle = |q'+\xi\rangle, \end{aligned} \tag{19}$$

すなわちまた

---

(5)　S はユニタリであるから，

$$\langle q'' | S^\dagger(\xi)\,S(\xi) | q' \rangle = c^*(\xi, q'')\,c(\xi, q')\,\delta(q''-q') = \delta(q''-q')$$

が成り立ち，これから $|c(\xi, q')| = 1$ が得られる．

$$\langle q' | S(\xi) | q'' \rangle = \langle q' | q''+\xi \rangle = \delta(q'-q''-\xi).$$

こうしてパラメータ ξ の任意の値に対して行列 $S(\xi)$ の要素が計算されたが，これから p の表現行列が得られる．それには ξ が無限小の量 ε に等しくなる極限において

$$S(\varepsilon) \sim 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} p\,\varepsilon$$

に注意する．これにより，

$$\delta(q'-q''-\varepsilon) = \langle q' | S(\varepsilon) | q'' \rangle \sim \delta(q'-q'') - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon \langle q' | p | q'' \rangle,$$

したがって

$$\langle q' | p | q'' \rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\delta(q'-q'')-\delta(q'-q''-\varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \delta'(q'-q''). \tag{20}$$

《関数》$\delta'(x)$ は奇関数であるから，明らかに $\langle q'' | p | q' \rangle = \langle q' | p | q'' \rangle^*$，したがって p はエルミートである．

同様に，q と p が交換関係 (12) を満たすことも確かめられる：

$$\begin{aligned} \langle q' | (qp-pq) | q'' \rangle &= (q'-q'') \langle q' | p | q'' \rangle \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} (q'-q'')\,\delta'(q'-q'') = \mathrm{i}\hbar\,\delta(q'-q'') \end{aligned}$$

(付録 A の等式 (30) を用いた)．

残された問題として，p がオブザーバブルであることを示さなければならない．そのために，表現 $\{q\}$ において p の固有値問題を解いてみる．固有値 p' に対する固有ケットを $|p'\rangle$ とする．等式

$$p | p' \rangle = p' | p' \rangle$$

を表現 $\{q\}$ において書き直し，(20) を考えに入れると，

$$\begin{aligned} p' \langle q' | p' \rangle = \langle q' | p | p' \rangle &= \int \langle q' | p | q'' \rangle \mathrm{d}q'' \langle q'' | p' \rangle \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int \delta'(q'-q'') \langle q'' | p' \rangle \mathrm{d}q'' = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'} (\langle q' | p' \rangle). \end{aligned}$$

これは変数 q' の関数 $\langle q' | p' \rangle$ に関する微分方程式であり，その一般解は a を任意の定数として

$$\langle q' | p' \rangle = a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q'/\hbar}$$

である．こうして，p は固有値 p' の連続スペクトルをもち，それは $-\infty$ から $+\infty$ までひろがっていることが確かめられた．これらの固有ベクトルは無限大のノルムをもつ．また定数の値を $a = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}$ にとれば，これらは直交規格化条件

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p'-p'')$$

を満たす．

さて，ベクトル $|p'\rangle$ の全体は完全性関係を満たすから，明らかに p はオブザーバブルである．実際，射影の演算子

$$P_p \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |p'\rangle \mathrm{d}p' \langle p'|$$

を表現 $\{q\}$ において表わす行列の要素は

$$\langle q'|P_p|q''\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q'|p'\rangle \mathrm{d}p' \langle p'|q''\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q'-q'')/\hbar}\,\mathrm{d}p' = \delta(q'-q'').$$

したがって確かに

$$P_p = 1$$

となる．

基本オブザーバブル p, q によって，この系のいろいろな力学変数を表わす演算子 $F(p, q)$ がすべて構成される．これらの演算子がエルミートであることを確かめるのはいつでも容易である．手落ちなくするには，これらが確かにオブザーバブルであることを示す必要がある．このように厳密な論点には立ち入らず，物理量を表わすエルミート演算子はいずれもオブザーバブルであることを議論せずに承認してしまうのが量子論ではふつうである．

§7. 簡単な空間のテンソル積による状態空間の構成

1次元の古典類似系をもつ系に対して空間 $\mathcal{E}$ を構成することができれば，N 次元の古典類似系をもつ系に対して同じ問題を解くことはやさしい．

後者の場合，力学変数は位置と運動量という $2N$ 個の基本変数の関数である．位置と運動量を表わすオブザーバブルは交換関係（6）と（7）にしたがう．これらは N 個の組 $(q_1, p_1), (q_2, p_2), \cdots, (q_N, p_N)$ に分けられ，各組は位置の成分の一つとそれに共役な運動量から成る．一つの組の各オブザーバブルは，他の組のすべてのオブザーバブルと交換する．

与えられた一つの組，たとえば (q_i, p_i) のオブザーバブルを一つの1次元系の基本オブザーバブルとみなすことができ，この系は前節で学んだものと同じ型である．このような系の状態空間 $\mathcal{E}_i$ を構成することができ，§6の結果によれば，$\mathcal{E}_i$ は直交規格化ケット $|q_i'\rangle$ の線形重ね合わせから成る．この添数 q_i' は連続であり，区間（$-\infty$, $+\infty$）のすべ

ての値をとることができる(*).

N 次元の系の力学的状態の空間 $\mathcal{E}$ は，こうしてつくられた空間 $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \cdots, \mathcal{E}_N$ のテンソル積（第7章，§6）

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{E}_N,$$

すなわち，ケット

$$|q'_1 q'_2 \cdots q'_N\rangle \equiv |q'_1\rangle |q'_2\rangle \cdots |q'_N\rangle \tag{21}$$

によって張られる空間である．空間 $\mathcal{E}_i$ の各演算子 q_i, p_i に対応して，積空間 $\mathcal{E}$ の演算子 q_i, p_i が確定する．こうして $2N$ 個の基本変数を表わすものとして，$2N$ 個の演算子が $\mathcal{E}$ のなかに確定する．さらに，テンソル積の規則によれば，一つの偏空間(**)のオブザーバブルにはつねに積空間のオブザーバブルが一つ対応し，異なる偏空間から来た二つのオブザーバブルは交換し，同じ偏空間 $\mathcal{E}_i$ から来た二つのオブザーバブルは $\mathcal{E}$ においても $\mathcal{E}_i$ における交換関係と同じ規則にしたがう．それゆえ，いまわれわれが $\mathcal{E}$ のなかにつくった $2N$ 個の演算子 $q_1, \cdots, q_N, p_1, \cdots, p_N$ はオブザーバブルであり，実際に交換関係（6）と（7）にしたがう．

各固有値 $q'_1, \cdots, q'_N$ を $-\infty$ から $+\infty$ まで変化させて得られるベクトル $|q'_1 \cdots q'_N\rangle$ の全体は空間 $\mathcal{E}$ の基底系をつくり，ある一つの表現，すなわち表現 $\{q\}$ を定める．この表現において q と p を表わす行列の要素を具体的に書いてみるのは有益である．そのために，省略記号

$$|q'\rangle \equiv |q'_1 q'_2 \cdots q'_N\rangle \tag{22}$$

$$\delta(q'-q'') \equiv \prod_{i=1}^{N} \delta(q'_i - q''_i) \equiv \delta(q'_1 - q''_1)\,\delta(q'_2 - q''_2) \cdots \delta(q'_N - q''_N) \tag{23}$$

$$\frac{\partial}{\partial q'_n}[\delta(q'-q'')] \equiv \delta'(q'_n - q''_n) \prod_{i \neq n} \delta(q'_i - q''_i) \tag{24}$$

を用いる．最後の式における $\prod_{i\neq n}$ は，値 n を除き1から N までの整数値を添字に与えて得られる $(N-1)$ 個の項の積をとることを示す．

§6の関係式（17），（18），（20）を使ってつぎつぎに，直交規格化関係

$$\langle q' | q''\rangle = \prod_{i=1}^{N} \langle q'_i | q''_i\rangle = \delta(q'-q''), \tag{25}$$

(*) ［訳注］ indice（英語 index）を“添数”と訳しておく．離散的（とびとび）なスペクトルをもつオブザーバブルの固有ベクトルなら，$\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n, \cdots$ のように添字（n）で区別されるが，連続スペクトルをもつ q_i の固有ケットではその固有値 q'_i を目じるしとするわけだから，この q'_i が ψ_n の添字 n に相当するわけである．

(**) ［訳注］ espace partiel（英語 partial space）を“偏空間”と訳しておく．

座標を表わす（対角）行列の要素

$$\langle q' | q_n | q'' \rangle = \langle q'_n | q_n | q''_n \rangle \prod_{i \neq n} \langle q'_i | q''_i \rangle = q'_n \delta(q' - q''), \qquad (26)$$

運動量を表わす（非対角型）行列の要素

$$\langle q' | p_n | q'' \rangle = \langle q'_n | p_n | q''_n \rangle \prod_{i \neq n} \langle q'_i | q''_i \rangle$$
$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \delta'(q'_n - q''_n) \prod_{i \neq n} \delta(q'_i - q''_i) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial q'_n} [\delta(q' - q'')] \qquad (27)$$

が得られる．

このように p と q を表わす行列の具体的な表現を使うと，交換関係（6）と（7）は容易に確かめられる．

この系の任意の力学変数は p と q の関数である．したがってそれに対応して空間 $\mathcal{E}$ の演算子が一つ確定する．この演算子がオブザーバブルであるということは確かめる必要がある．さきに述べた習慣にしたがい，たいていの場合このことは議論をまたずに承認される．

一つの系の状態空間をもっと簡単な空間のテンソル積として構成するのは，きわめて一般的な方法である．実際に，一つの系の力学変数をいくつかの《基底》変数の関数として表わすことがいつでもできる．そしてこれらの基底変数はしばしばいくつかのクラスに分類され，与えられた一つのクラスに属する任意の変数と他のクラスに属する任意の変数とは共立となるようにできる.具体的に考えるため,《基底》変数が二つのクラス $(A_1, B_1, \cdots)$ と $(A_2, B_2, \cdots)$ に分類され，（1）型の各変数と（2）型の各変数が共立であるとしよう．各クラスを別々に考えると，それぞれ一つの部分系とでも言うべきものが定義されることになるが，それから必要に応じてもとの系の状態空間をつくることができる．たとえば部分系（1）と（2）に関する状態空間をそれぞれ $\mathcal{E}_1$, $\mathcal{E}_2$ とすると，明らかに系全体の状態空間 $\mathcal{E}$ はテンソル積

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

である．

II．運動方程式

§8. 時間的変化の演算子とシュレーディンガー方程式

量子的現象の精細なスケールでは，系と観測装置との明確な分離が存在しないという事実により，量子系が観測を受けるやいなや．この系の変化は因果律に厳密にはしたがわな

くなる．しかし，外部の干渉からまったく孤立した量子系は正確に予見できる形で変化する．時刻 t_0 におけるその力学的状態を表わすケットベクトルを $|\psi(t_0)\rangle$ とし，それよりあとの時刻 t における状態を表わすケットベクトルを $|\psi(t)\rangle$ とする．今後はこの系が時間 (t_0, t) のあいだに一度も観測を受けなかったと仮定する． このとき，$|\psi(t_0)\rangle$ を与えると $|\psi(t)\rangle$ は正確に決定される．この節で詳しく論じるのは，この変化の基本法則である．

まず第一に，状態の線形重ね合わせは時間の経過のなかで保存されることを要請する．これにより，$|\psi(t_0)\rangle$ から $|\psi(t)\rangle$ への対応は線形となり，一つの線形演算子 $U(t, t_0)$ が

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle \tag{28}$$

によって定まる．これは時間的変化の演算子と名づけられている．

系が保存系であるとき，すなわちハミルトニアン H で表わされるそのエネルギーが直接には時刻に関係しない場合には，エネルギー E をもつ系の運動が周期運動であることと，その（角）振動数 ω がアインシュタインの法則

$$E = \hbar\omega \tag{29}$$

によって与えられることを要求するならば，$U(t, t_0)$ は実際に決定される．

事実，H の固有ベクトルは空間 $\mathcal{E}$ を張るから，U を決めるにはこれらのベクトルの一つ一つに対するその作用を知ればよい．エネルギー E に対する H の固有ベクトルを $|u_E(t_0)\rangle$ とする：

$$H\,|u_E(t_0)\rangle = E\,|u_E(t_0)\rangle. \tag{30}$$

アインシュタインの関係により，このベクトルは時間の経過につれて，法則

$$|u_E(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t_0)}\,|u_E(t_0)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t_0)/\hbar}\,|u_E(t_0)\rangle$$

にしたがって変化することを要請する．ここで (30) を考えに入れれば，

$$|u_E(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}\,|u_E(t_0)\rangle$$

となる．したがって

$$U(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}. \tag{31}$$

この等式の両辺を t について微分すると[6]，微分方程式

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t, t_0) = HU(t, t_0)} \tag{32}$$

を得る．$U(t, t_0)$ はこの方程式の解で，初期条件

(6) 連続的なパラメータ t によって決まる演算子 $X(t)$ の t に関する変化率は，関数の変化率と同じようにして定められる（問題３を参照）：

$$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{X(t+\varepsilon)-X(t)}{\varepsilon}.$$

$$\boxed{U(t_0, t_0) = 1} \tag{33}$$

を満たすものである．

意味を拡張して，量子系が保存系でない場合も含めて，ごく一般に演算子 $U(t, t_0)$ は微分方程式 (32) の解であり，初期条件 (33) を満たすものであるということを承認する．保存系でない場合，H は直接に時刻に関係し，関係式 (29) はまったく意味を失い，演算子 U は式 (31) によっては与えられない．

U はまた積分方程式

$$\boxed{U(t, t_0) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} HU(t', t_0)\,\mathrm{d}t'} \tag{34}$$

によっても定められることに注意する．

(32), (33) あるいは積分方程式 (34) は量子系の変化に関する基本法則を表わす．この法則と同値な表現の一つはシュレーディンガー方程式すなわち系の力学的状態の変化に関する微分方程式である．この方程式を得るには (28) の両辺を微分し，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t, t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle$$

のなかの $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t, t_0)$ に，(32) から得られる式を代入する．その結果は

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle.} \tag{35}$$

ベクトル $|\psi(t)\rangle$ のノルムが時の経過のなかで一定に保たれるためには，H がエルミートであることが必要十分である．このことはシュレーディンガー方程式から容易に証明される．ハミルトニアンのエルミート性はいつでも満たされていると仮定しよう．

さらに，H がエルミートならば，$U(t, t_0)$ はユニタリ演算子である．H が時刻によらないときには，このことは U の具体的な式 (31) からただちに確かめられる．しかし，H が時刻に依存するときでも，シュレーディンガー方程式によれば，

$$|\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle = \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\,\mathrm{d}t\right)|\psi(t)\rangle$$

を得る．H がエルミートであるから，演算子

$$U(t+\mathrm{d}t, t) \equiv 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\,\mathrm{d}t$$

は無限小ユニタリ演算子である（第7章 §22 を参照）．時刻 t におけるケットから時刻 $t+\mathrm{d}t$ におけるケットへは，無限小ユニタリ変換によって移る．それゆえ，$|\psi(t_0)\rangle$ を

$|\psi(t)\rangle$ に移す変換 $U(t, t_0)$ は，無限小ユニタリ変換を引きつづき行なったものであり，無限小ユニタリ演算子の積として，$U(t, t_0)$ もユニタリ演算子である．

§9. シュレーディンガー《表示》

シュレーディンガー方程式を与えることにより，本章で説明するはずであった量子的現象の記述に関する一般的な構図が完成する．本質的なことに限れば，この構図はつぎのように要約される．

1° 力学的状態の規定

一つの量子系の力学的状態は，十分に正確なデータ，すなわち共立する変数の完全集合に属する力学変数がとる具体的な値の集合によって規定される．このような完全集合に属する変数を同時に測定することにより，測定が行なわれた時刻 t における系の状態が一義的に定まる．

2° 状態空間の規定

各状態は，あるベクトル空間 $\mathcal{E}$ のケットベクトル $|\chi\rangle$（1に規格化され，位相因子を除いて定められたもの）によって表わされる（重ね合わせの原理）．各力学変数はこの空間のオブザーバブルによって表わされる．この変数が確定値をとる状態は，このオブザーバブルの固有ベクトルによって表わされる状態だけであり，このとき変数がとる値は上記の固有ベクトルに対する固有値である．オブザーバブルはいくつかの代数法則を満たし，それらは交換関係を与えることによって完全に指定される．共立する変数は交換するオブザーバブルによって表わされる．

3° 確率の規定

この量子系に対して，共立する力学変数の完全集合を同時に測定するとき，この系を状態 $|\chi\rangle$ に見いだす確率（すなわち $|\chi\rangle$ によって表わされる力学的状態を定めるようなこれらの変数の特殊値を見いだす確率）は，測定が行なわれる瞬間における系の力学的状態を表わす（1に規格化された）ベクトル $|\psi\rangle$ に $|\chi\rangle$ を掛けた内積の絶対値の二乗，すなわち

$$|\langle\chi|\psi\rangle|^2$$

に等しい．もっと一般に，この系を部分空間 $\mathcal{E}_D$ のなかに見いだす確率（すなわちこの部分空間に属する状態のうちの一つにこの系を見いだす確率）は，この部分空間への射影子 P_D の平均値，すなわち

$$\langle P_D\rangle = \langle\psi|P_D|\psi\rangle$$

に等しい．

4° 変化の方程式

外部からの干渉がまったくないとき，系の力学的状態は時間の経過とともに厳密な因果律にしたがって変化する．空間 $\mathcal{E}$ において状態を表わすベクトル $|\psi(t)\rangle$ はシュレーディンガー方程式 (35) にしたがって連続的な運動を行なう．言いかえると，$|\psi(t_0)\rangle$ から $|\psi(t)\rangle$ へはユニタリ変換 (28) によって移り，そのなかの $U(t, t_0)$ は (32) と (33) によって定められるユニタリ演算子である．

このようにして，与えられた初期時刻における系の力学的状態 $|\psi\rangle$ がわかれば，t_0 よりあとの与えられた時刻 t_1 においてこの系にどんな測定が行なわれても，その結果の統計的分布を予想することができる．実際，測定が始まる瞬間における系の力学的状態は

$$|\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_0)|\psi\rangle$$

であり，したがって，あらかじめ指定された状態 $|\chi\rangle$ に系を見いだす確率は

$$|\langle\chi|\psi(t_1)\rangle|^2 = |\langle\chi|U(t_1, t_0)|\psi\rangle|^2. \tag{36}$$

ここで採用した現象の記述法においては，系の状態が時間とともに変わるケットベクトル $|\psi(t)\rangle$ によって表わされている．これに対して物理量は，少なくとも直接時間に関係しないものは，空間 $\mathcal{E}$ における決まったオブザーバブルによって表わされる．同様に，これらのオブザーバブルの固有ベクトルも空間 $\mathcal{E}$ のなかの決まったベクトルであり，特に式 (36) のベクトル $|\chi\rangle$, $|\psi\rangle$ もそうである．このような現象の記述法は**シュレーディンガー《表示》**[7]と呼ばれる．

§10. ハイゼンベルク《表示》

シュレーディンガー表示のケットとオブザーバブルにある一つのユニタリ変換を施し，変換された量に，もとの量と同じ物理的意味を与えることにすれば，この表示と厳密に同値な現象の記述法が得られる．このような変換によってオブザーバブルは同じ固有値のス

---

(7) この《表示 (représentation)》という概念と，行列によるベクトル空間のベクトルと演算子の表現 (représentation) という概念とを混同してはならない．ここで問題になっている《表示》は量子系の運動を表わすものである．混乱を避けるためには，シュレーディンガーの《記述法》という言葉を用いた方がよかったであろう．《représentation》という術語が慣用によって認められているのは不幸なことである．これら二つの概念を区別するため，《表示》という語を上記の意味に用いるときにはいつでも便宜上引用符《 》のなかに入れる．ここで必要となった区別は，行列に対するユニタリ変換と，ベクトルおよび演算子に対するユニタリ変換との区別に似ている (第7章，第Ⅲ節を参照)．

［訳注］ われわれはこれら二つの概念を《表示》と《表現》によって区別し，必ずしも上記の規約にしたがわない．

ベクトルをもつオブザーバブルに変換され，固有ベクトルは固有ベクトルに変換され，代数関係，共役関係および内積は保存される．実際に測定できる量は内積の絶対値だけであるから（(36) を参照），新しい量を用いて行なわれる予想は，もとの量による予想と一致することは明白である．

特に，シュレーディンガー表示のケットとオブザーバブルに対して，時刻に依存するユニタリ変換 $U^{\dagger}(t, t_0)$ を施すと**ハイゼンベルク表示**が定められる．もとの量には添字 S をつけ，新しい量には添字 H をつけることにすると，時刻 t における系の力学的状態を表わすケット

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi_S(t_0)\rangle$$

は，動かないケット

$$|\psi_H\rangle = U^{\dagger}(t, t_0)\,|\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle \tag{37}$$

に変換される．反対に，シュレーディンガー表示のオブザーバブル A_S は

$$A_H(t) = U^{\dagger}(t, t_0)\, A_S\, U(t, t_0) \tag{38}$$

に変換される．

A_S が直接には時刻に依存しないときでも，A_H は連続的な運動を行なう．さらに，微分方程式 (32) およびそれにエルミート共役な方程式を考慮しながら，上記の式の両辺を微分すると，

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A_H}{\mathrm{d}t} &= -U^{\dagger}HA_SU + \mathrm{i}\hbar U^{\dagger}\frac{\partial A_S}{\partial t}U + U^{\dagger}A_SHU \\ &= U^{\dagger}[A_S, H]\,U + \mathrm{i}\hbar U^{\dagger}\frac{\partial A_S}{\partial t}U \end{aligned} \tag{39}$$

を得る．この式において，Hはシュレーディンガー表示のハミルトニアンである．ハイゼンベルク表示のハミルトニアン

$$H_H = U^{\dagger}HU$$

を導入すれば，

$$U^{\dagger}[A_S, H]\,U = [A_H, H_H]$$

となる．

他方，A_S はシュレーディンガー表示の基本オブザーバブルの関数として，直接時刻に依存することもありうる．(39) の右辺第2項はその影響を示すものである．$\partial A_S/\partial t$ はシュレーディンガー表示による〔基本〕オブザーバブルの関数の一つである．これらのオブザーバブルを対応するハイゼンベルク表示のオブザーバブルに置き換えて得られる関数を $\partial A_H/\partial t$ とすれば，明らかに

$$\frac{\partial A_H}{\partial t} = U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U.$$

その結果，(39) は

$$\boxed{i\hbar \frac{\mathrm{d}A_H}{\mathrm{d}t} = [A_H, H_H] + i\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t}} \tag{40}$$

と書かれる．この方程式は**ハイゼンベルク方程式**の名で知られている．

結局，シュレーディンガー表示のベクトル空間全体を運動させ，量子系の力学的状態が一つの動かないケット $|\psi_H\rangle$ によって表わされるようにこの運動を選べば，ハイゼンベルク表示が得られる．言いかえると，ハイゼンベルク表示の動かないベクトルはいずれも，この量子系に可能な運動を表わす．これに反していろいろな物理量は時間の経過とともに変化するオブザーバブルによって表わされ，その変化は法則 (38) にしたがう，あるいは同じことになるが，初期条件 $A_H(t_0) = A_S(t_0)$ の下にハイゼンベルク方程式 (40) にしたがう．

ハイゼンベルク表示によるオブザーバブルの関数ならばどんな関数にも (38) と (40) は適用される．特に式 $e^{i\xi A_H}$ あるいは射影子 $P_D^{(H)}$ がそれである．ここで $P_D^{(H)}$ は，A_H のスペクトルのうち一定の領域 D に属する固有値に対する固有ベクトルによって張られる部分空間への射影子である．

また，共立する変数の全体についてのデータを表わすケット $|\chi_H\rangle$ は一般に時刻に依存し，シュレーディンガー表示における同等なケット $|\chi_S\rangle$ から，式

$$|\chi_H(t)\rangle = U^\dagger(t, t_0)|\chi_S\rangle \tag{41}$$

によって導かれる．

量子系の運動が時刻 t_0 からのち（動かない）ケット $|\psi_H\rangle$ によって表わされるとする．それ以後の時刻 t_1 に行なわれる測定の際，系が状態 $|\chi_H\rangle$ に見いだされる確率は

$$|\langle\chi_H(t_1)|\psi_H\rangle|^2$$

であり，シュレーディンガー表示において対応するケットから得られる大きさ（式 (36)）に等しい．内積はユニタリ変換 $U^\dagger(t_1, t_0)$ によって変わらないからである．

§11. ハイゼンベルク表示と対応原理

いまわかったように，シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示は厳密に同値である．実用上は，シュレーディンガー表示の方が計算に適するから，より多く用いられる．事実，シュレーディンガー方程式はベクトルのあいだの方程式であり，演算子のあいだの方程式であるハイゼンベルク方程式よりも本来解きやすい．しかし，量子系のある種の一

般的性質を明らかにするには，ハイゼンベルク表示による方がいっそう直接的である．

古典理論と量子論との形式的類似は，ハイゼンベルク表示を用いるとき特に際立ってくる．実際，古典系の運動と同じように，量子系の運動もハイゼンベルク表示においては，系に結びついた力学変数の運動として現われる．

そこで類似古典系をもつ量子系を考え，双方の系の運動を比較する．古典系の各物理量には量子系の物理量が一つずつ対応する．両者の相違はただ，古典系の物理量がふつうの代数法則にしたがう量であるのに対して，量子系における類似の量は非可換代数にしたがう演算子であるということによる．しかし，非可換代数の式とふつうの代数の式とが同一視されるような測定においては，量子的量の運動方程式は古典系の類似量の方程式と同じになる．実際，変数 $q_1, \cdots, q_N$ と $p_1, \cdots, p_N$ に関するハイゼンベルク方程式は

$$\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_i, H] = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p_i, H] = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (i = 1, 2, \cdots, N) \qquad (\mathrm{I})$$

と書かれる．これらの式を得るには，q と p のあいだの基本的な交換関係と，それから出てくる性質（第5章 (67), (68)）を考慮すればよい．方程式系（I）は古典力学のハミルトン正準系と形式上同じである．

もっと一般に，古典力学変数 $A_{\mathrm{cl.}} = A(q_1, \cdots, q_N; p_1, \cdots, p_N; t)$ は運動方程式

$$\frac{\mathrm{d}A_{\mathrm{cl.}}}{\mathrm{d}t} = \{A_{\mathrm{cl.}}, H_{\mathrm{cl.}}\} + \frac{\partial A_{\mathrm{cl.}}}{\partial t} \qquad (42)$$

にしたがう．ここで $\{A_{\mathrm{cl.}}, H_{\mathrm{cl.}}\}$ は $A_{\mathrm{cl.}}$ と $H_{\mathrm{cl.}}$ のポアッソン括弧式であり，

$$\{A, H\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

によって定義される．ポアッソン括弧式 $\{A, H\}$ を交換子 $[A_H, H_H]/\mathrm{i}\hbar$ と同一視することにすれば，古典的方程式 (42) は対応するハイゼンベルク方程式と同じであることがわかる．基本交換関係のほか，交換子の代数法則とポアッソン括弧式の代数法則との類似を利用すれば，実際にこれら二つの式が同じであることを証明できる．ただし，ポアッソン括弧式を具体的に書くとき，q と p の順序を適当に選ぶことにする．

§12. 運動の定数

運動の定数という概念はハイゼンベルク表示によると特に理解しやすい．直接には時刻に依存しない力学変数が運動の定数となるのは，ハイゼンベルク表示においてそれを表わすオブザーバブル C_H が時間的に一定となる場合である．したがって，その固有ベクトル系は動かず，たまたまこの量の測定が行なわれるとすれば，どのような状況の下においても，測定結果の統計的分布は測定が行なわれる時刻によって変わらない．

運動の定数 C_H についてここに述べた定義によれば，

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}C_H=[C_H,H_H]=0$$

となる．それゆえ，運動の定数はハミルトニアンと交換するオブザーバブルによって表わされる．さらにこの結果はシュレーディンガー表示においてもまたハイゼンベルク表示における と同様に成り立つ．なぜなら交換関係は一方から他方へ移るとき保存されるからである．

また，C_H は時刻に依存しないから，初期値 C_S に等しい：

$$C_H(t)=C_H(t_0)=C_S=C.$$

特に，系の力学的状態がハイゼンベルク表示において C の固有ベクトルで表わされるとき，すなわち

$$C_H|\psi_H\rangle=c|\psi_H\rangle$$

であるとき，変数 C は時間の経過とともに変わらない確定値 c を取りつづける．固有値 c は良い量子数と言われる．また容易に示されるように，C は変換の演算子 $U(t,t_0)$ と交換する．したがってシュレーディンガー表示のケット $|\psi_S(t)\rangle$ もひきつづき固有値 c の部分空間のなかにとどまる．すなわち

$$C|\psi_S(t)\rangle=c|\psi_S(t)\rangle.$$

§13. 平均値の変化の方程式と時間-エネルギー不確定性関係

ハイゼンベルク表示から出発すると，与えられたオブザーバブル A_H の平均値に対する微分方程式を書き下すことが特にやさしくなる．実際，$|\psi_H\rangle$ が時刻によらないから，

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi_H|A_H|\psi_H\rangle=\left\langle\psi_H\left|\frac{\mathrm{d}A_H}{\mathrm{d}t}\right|\psi_H\right\rangle$$

ハイゼンベルク方程式を使えば，第5章の方程式 (72) がもう一度得られる．すなわち

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle. \tag{43}$$

特に，系(I)に対してこの手続きを行なえば，エーレンフェストの方程式(第6章，§2)がもう一度得られる．

方程式 (43) の応用として，時間-エネルギー不確定性関係(第4章 §10を参照)を詳しく説明しよう．ハミルトニアン H が直接には時刻に依存しない系を考え，この系のもう一つのオブザーバブルで直接には時刻に依存しないものを A としよう．与えられた時刻 t における系の力学的状態を調べる．この状態を表わすベクトルを $|\psi\rangle$ とする．他方

A と H の標準偏差をそれぞれ $\Delta A, \Delta E$ によって表わす．ベクトル $(A-\langle A\rangle)|\psi\rangle$ と $(H-\langle H\rangle)|\psi\rangle$ にシュワルツの不等式を適用し，§4の取り扱いを忠実に繰り返す．計算しおわった結果は

$$\Delta A\cdot\Delta E \geqslant \frac{1}{2}|\langle[A, H]\rangle| \tag{44}$$

となり，等号の成り立つのは $|\psi\rangle$ が方程式

$$(A-\alpha)|\psi\rangle = \mathrm{i}\gamma(H-\varepsilon)|\psi\rangle$$

を満たすときである．ここで $\alpha, \gamma, \varepsilon$ はある実定数とする（(10) を参照）．ところで (43) によれば $\langle[A, H]\rangle = \mathrm{i}\hbar\, \mathrm{d}\langle A\rangle/\mathrm{d}t$ であるから，不等式 (44) はまた

$$\frac{\Delta A}{|\mathrm{d}\langle A\rangle/\mathrm{d}t|}\cdot\Delta E \geqslant \frac{1}{2}\hbar$$

と書かれる．ここで

$$\tau_A = \frac{\Delta A}{|\mathrm{d}\langle A\rangle/\mathrm{d}t|} \tag{46}$$

と置けば，

$$\tau_A\cdot\Delta E \geqslant \frac{1}{2}\hbar. \tag{45}$$

τ_A は A の統計的分布の変化を特徴づける一つの時間である．すなわち，この分布の中心 $\langle A\rangle$ が分布の幅に等しい大きさを移動するために要する時間，言いかえれば，この統計的分布が明瞭に形を変えたと認められるのに必要な時間である．このように，系の各力学変数に対してその変化に特有な時間が定められる．

このように定められた時間のうちで最も短いものを τ とする．τ は系そのものの変化に特有な時間とみなされる．時刻 t' においてどんな測定がこの系に対して行なわれるとしても，時刻 t との差 $|t-t'|$ が τ より小さい限り，t' における測定結果の統計的分布は，t において得られるはずの分布と事実上同じである．

不等式 (45) により，この時間 τ とエネルギーの偏差 ΔE とは時間－エネルギー不確定性関係

$$\tau\cdot\Delta E \geqslant \frac{1}{2}\hbar \tag{47}$$

を満たす．

特に系が定常状態にあるとき，A が何であっても $\mathrm{d}\langle A\rangle/\mathrm{d}t = 0$ であり，したがって τ は無限大になる．一方 $\Delta E = 0$ であるから (47) が満たされる．

§14. 中間表示

シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示以外の表示も考えられる．シュレーディンガー表示（またはハイゼンベルク表示）のベクトルとオブザーバブルに対するユニタリ変換によって，いつでも新しい表示が定められる．これらの表示はいずれも量子的現象について厳密に同値な記述を与える．それゆえ，一つ一つの問題に対して，その解決に最も適する表示が採用される．

量子力学のすべての問題は，完全さと正確さの程度に差はあるにせよ，つねにユニタリ演算子 $U(t, t_0)$ の諸性質を決定することに帰着する．実際，この理論によるすべての予想は，(36) に現われるような $U(t, t_0)$ の行列要素によって与えられる．それゆえ方程式 (32) を解くことがこの理論の中心問題となる．この方程式の近似解 $U^{(0)}(t, t_0)$ が知られたときは，多くの場合

$$U = U^{(0)} U' \tag{48}$$

と置くのが便利である．この式を方程式 (32) に代入し，両辺に左からユニタリ演算子 $U^{(0)\dagger}$ を掛けると，微分方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} U' = U^{(0)\dagger}\left(HU^{(0)} - i\hbar \frac{dU^{(0)}}{dt}\right) U' \tag{49}$$

が得られる．U' はこの方程式の解で初期条件

$$U'(t_0, t_0) = 1$$

を満たすものである．近似が正しいならば，U' は時刻とともにゆるやかに変わる演算子である．このことはまた方程式 (49) からも明白である．なぜならば，この場合には演算子 $HU^{(0)} - i\hbar(dU^{(0)}/dt)$ がほとんど0になるからである．それゆえ方程式 (49) は方程式 (32) よりも近似解法に適する[8]．

$U^{(0)}$ がユニタリであるから，演算子

$$H^{(0)}(t) \equiv i\hbar \left[\frac{d}{dt} U^{(0)}(t, t_0)\right] U^{(0)\dagger}(t, t_0)$$

はエルミートである（問題6）．したがって $U^{(0)}(t, t_0)$ はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^{(0)} = H^{(0)} U^{(0)}, \qquad U^{(0)}(t_0, t_0) = 1 \tag{50}$$

の厳密な解である．それゆえハミルトニアン H は二つのエルミート演算子の和

$$H = H^{(0)} + H'$$

---

(8) ここに述べた取り扱い方は，初等的な微分方程式論における定数変化法を演算子間の微分方程式に一般化したものである．

であり，このうちの一つ H' は，ここで考えられている仮定の下に，小さな摂動とみなされ，もう一つの $H^{(0)}$ は，積分することが可能な一つのシュレーディンガー方程式のハミルトニアンである．これらの記号を使うと，方程式（49）は簡単に

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U' = H'_I U' \tag{51}$$

と書かれる．このなかの H'_I は時刻に依存するユニタリ変換 $U^{(0)\dagger}$ によって H' から導かれる：

$$H'_I = U^{(0)\dagger}H'U^{(0)}. \tag{52}$$

このようなときにはすべての議論を通じて，シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示の中間の表示を採用するとつごうがよい．その表示は，シュレーディンガー表示のベクトルとオブザーバブルにユニタリ変換 $U^{(0)\dagger}(t, t_0)$ を施して得られるものである．この新しい表示ではベクトルとオブザーバブルに添字 I を付ける．

$$|\phi_I(t)\rangle = U^{(0)\dagger}|\phi_S(t)\rangle \tag{53}$$

$$A_I(t) = U^{(0)\dagger}A_S U^{(0)}. \tag{54}$$

この中間表示において，系が実際に行なう運動を表わすベクトル $|\phi_I(t)\rangle$ は $U'|\phi_S(t_0)\rangle$ に等しい．方程式（51）により，このベクトルは一つのシュレーディンガー方程式にしたがって時刻とともに（ゆるやかに）変化し，そのハミルトニアンは摂動エネルギー H'_I である：

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi_I(t)\rangle = H'_I|\phi_I(t)\rangle. \tag{55}$$

これに対して，物理量は動くオブザーバブルによって表わされる．そしてこれらのオブザーバブルはハイゼンベルクの運動方程式にしたがい，この方程式は《非摂動》ハミルトニアン $H_I^{(0)}$ によって書き表わされる：

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_I = [A_I, H_I^{(0)}] + i\hbar\frac{\partial A_I}{\partial t}. \tag{56}$$

このことは，ハイゼンベルク方程式をつくるとき（38）に対して施したのと同じような手続きを（54）に対して行なえば，容易に示される．

III．理論のいろいろな表現

§15．表現の定義

第Ｉ，II節で展開した理論によれば，一つの量子系を記述するための要素が全部一つにまとめられるのは，基本的な力学変数，それらを表わすオブザーバブルが満たす交換関

係，これらの基本的なオブザーバブルの関数として表わされるハミルトニアンの具体的な式が定められたときであり，ハミルトニアンによって系の時間的変化が決定される．こうして，系がとりうるいろいろな力学的状態を表わすベクトルの空間 $\mathcal{E}$ をつくり，系に結びついたいろいろなオブザーバブルに対する固有値問題を解くことにより，$\mathcal{E}$ のベクトルの物理的意味を定め，変化の基本方程式を立ててこれを解き，最後にこの理論が厳密に予想しうる測定結果の統計的分布を計算することができる．

空間 $\mathcal{E}$ におけるこれらの解析的あるいは代数的な問題をすべて解決するためには，いつでもこの空間のなかのベクトルから完全直交規格化系を選ぶことができ，その選び方は無限にある．そしてこのベクトル系を基底にもつ表現において，$\mathcal{E}$ の演算子とベクトルをそれらの行列で表わすことができる．

このようにして，系の力学変数はすべて正方エルミート行列によって表わされ，力学的状態はすべて列ベクトルによって（またはそのエルミート共役である行ベクトルによっても）表わされ，ベクトルは定数を除いて定まる．

異なる基底系は数多くあるから，この理論がとりうる表現もそれだけ数多くある．そのうちの一つから他の一つへはユニタリ変換によって移る．行列に対するこれらのユニタリ変換を，演算子とベクトルに対するユニタリ変換と混同してはならない．後者は第II節で論じたように，量子系の運動そのものの《表示》を変えることを許すものである．

たいていの場合，表現を定めるためには交換するオブザーバブルの完全集合を指定する．それらに共通な固有ベクトルがこの表現の基底ベクトルになる．この表現の基底オブザーバブルとこれらのオブザーバブルの関数はすべて対角行列によって表わされる．

§16. 波動力学

波動力学は量子論の特殊な定式化であり，これはシュレーディンガー表示を採用し，位置の変数を対角型にするような表現をとるときに得られる．

§7で学んだような N 次元の類似古典系をもつ量子系にもどろう．位置座標 $q_1, q_2, \cdots, q_N$ は交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，一つの表現すなわち表現 $\{q\}$ を定める．空間 $\mathcal{E}$ そのものを構成するときに，この表現がすでに利用されている．基底ベクトルの位相と規格化を適当に選ぶことにより，われわれは q と p の行列要素に対するきわめて簡単な表示式を得ている（式 (26)，(27)）．

表現 $\{q\}$ の基本式は直交規格化関係 (25) と完全性関係であり，§7の省略記号 ($\mathrm{d}q \equiv \mathrm{d}q_1 \mathrm{d}q_2 \cdots \mathrm{d}q_N$) によれば，後者は

$$P_q \equiv \int |q'\rangle \mathrm{d}q' \langle q'| = 1 \qquad (57)$$

と書かれる.

任意のケット $|\psi\rangle$ は1列の行列で表わされ，その成分は $\langle q'|\psi\rangle$ である．これはまた，配置空間の座標 $q'_1, q'_2, \cdots, q'_N$ の関数として $\psi(q'_1, q'_2, \cdots, q'_N)$ と書き表わすこともできる．この関数が，波動力学の言葉によって系の力学的状態を表わす波動関数である：

$$\langle q'|\psi\rangle \equiv \langle q'_1 q'_2 \cdots q'_N|\psi\rangle \equiv \psi(q'_1, q'_2, \cdots, q'_N). \tag{58}$$

$|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積は対応する波動関数の内積にちょうど等しく，後者は波動力学で定義されたものである：

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|P_q|\psi\rangle = \int\langle\varphi|q'\rangle \mathrm{d}q'\langle q'|\psi\rangle = \int\varphi^*(q')\psi(q')\,\mathrm{d}q'. \tag{59}$$

波動力学の演算子は表現 $\{q\}$ においてオブザーバブルを表わす行列と同じものであることを確かめよう.

オブザーバブル q_n を表わす行列の式 (26) を使えば，$q_n|\psi\rangle$ は波動関数

$$\langle q'|q_n|\psi\rangle = q'_n\langle q'|\psi\rangle = q'_n\psi(q')$$

によって表わされることがわかる．もっと一般に，配置空間の座標における関数 $V(q) \equiv V(q_1, q_2, \cdots, q_N)$ を任意にとるとき，ケット $|\psi\rangle$ に対するその作用は，$\psi(q')$ に $V(q')$ を掛けて得られる関数

$$\langle q'|V(q)|\psi\rangle = V(q')\psi(q') \tag{60}$$

によって表わされる.

オブザーバブル p_n を表わす行列の具体的な式 (27) を使えば，$p_n|\psi\rangle$ は波動関数

$$\left.\begin{aligned}\langle q'|p_n|\psi\rangle &= \int\langle q'|p_n|q''\rangle\mathrm{d}q''\langle q''|\psi\rangle \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int\frac{\partial}{\partial q'_n}[\delta(q'-q'')]\psi(q'')\,\mathrm{d}q'' = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'_n}\psi(q')\end{aligned}\right\} \tag{61}$$

によって表わされることがわかる．それゆえ p_n は偏微分演算子 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_n$ によって表わされ，この演算子はその右にある波動関数に作用する.

こうしてわれわれがさきに意図した同等性が，位置座標の関数（式 (60)）と運動量成分（式 (61)）に対してはうまく確かめられた．しかしどんなオブザーバブルも q の関数と p との代数的な式であるから，この同等性の証明は容易に一般化され，その結果，波動力学においては任意の物理量 $A(q;p)$ が演算子

$$A\left(q;\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q}\right)$$

によって表わされることがわかる.

具体的に見るために，系のエネルギー H を考えよう．ポテンシャルエネルギーが純粋に静的であるとすれば，H は

$$H(q\,;p)=\sum_i\frac{p^2}{2m_i}+V(q_1,\cdots,q_N)$$

の形をしている．表現 $\{q\}$ においてエネルギーを表わす行列は

$$\langle q'|H|q''\rangle=H\left(q'\,;\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\delta(q'-q'')=\left[\sum_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\frac{\partial^2}{\partial q_i'^2}+V(q')\right]\delta(q'-q'')$$

の形をしている．最後の行のなかで，括弧［　］内の式は $\delta(q'-q'')$ に作用する演算子とみなさなければならない．ここで $\delta(q'-q'')$ は q' の関数と考える．したがってベクトル $H|\psi\rangle$ は波動関数

$$\langle q'|H|\psi\rangle\equiv H\psi(q')=\left[\sum_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\frac{\partial}{\partial q_i'^2}+V(q')\right]\psi(q')$$

によって表わされる．

最後に，シュレーディンガー表示を採用し，変化の基本方程式 (35) を表現 $\{q\}$ によって書き表わすと，ふつうの形のシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q\,;t)=H\psi(q\,;t)$$

がもう一度得られる．

これによって，波動力学は表現 $\{q\}$ とシュレーディンガー表示による量子論の定式化と同じものであることがすっかり証明された．

§17. 表　現　$\{p\}$

別の表現の例として，運動量の成分が対角型となるような表現 $\{p\}$ をあげよう．この表現の基底ベクトルを $|p'\rangle\equiv|p_1'\rangle|p_2'\rangle\cdots|p_N'\rangle$ で表わす．これは $p_1,p_2,\cdots,p_N$ に共通な固有ベクトルで，固有値 $p_1',p_2',\cdots,p_N'$ に対応するものである．われわれはこれらのベクトルが直交規格化されていると仮定する：

$$\langle p'|p''\rangle=\delta(p'-p'').$$

これらは完全性関係

$$P_p\equiv\int|p'\rangle\mathrm{d}p'\langle p'|=1$$

を満たす．(この §17 を通じて §7 と §16 で導入したのと同じような省略記号を用いる)．

§6 の結果によれば，表現 $\{q\}$ におけるベクトル $|p'\rangle$ の波動関数は

$$\langle q'|p'\rangle\equiv\prod_{i=1}^N\langle q_i'|p_i'\rangle=(2\pi\hbar)^{-N/2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1'q_1'+\cdots+p_N'q_N')/\hbar}$$

である．q' と p' の関数とみなせば，$\langle p'|q'\rangle$ $(=\langle q'|p'\rangle^*)$ はユニタリ行列 S であ

り，表現 $\{q\}$ における行列を表現 $\{p\}$ における行列に変換する．表現 $\{p\}$ においてケットベクトル $|\psi\rangle$ はその《運動量空間の波動関数》

$$\Phi(p') \equiv \langle p' | \psi \rangle$$

によって表わされる．明らかに $\Phi(p')$ は，配置空間の波動関数 $\Psi(q') \equiv \langle q' | \psi \rangle$ の（適当に規格化された）フーリエ変換である．すなわち

$$\begin{aligned}\Phi(p') &= \langle p' | \psi \rangle = \int \langle p' | q' \rangle \mathrm{d}q' \langle q' | \psi \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}N} \int \Psi(q')\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p'_1 q'_1 + \cdots + p'_N q'_N)/\hbar}\, \mathrm{d}q'.\end{aligned}$$

容易に確かめられるように，関数 $\Phi(p')$ に対する演算子 p_n の作用は p'_n を掛けることになり，q_n の作用は偏微分演算子 $\mathrm{i}\hbar\,\partial/\partial p'_n$ によって表わされる（このことはまた直接にも証明されている）．

具体的に見るために，静ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかの質量 m の粒子を考え，そのエネルギーの固有値に関する式を表現 $\{\boldsymbol{p}\}$ で書いてみよう．この系のエネルギーはオブザーバブル

$$H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \equiv \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r})$$

によって表わされる．基底ベクトル $|\boldsymbol{p}'\rangle$ は運動量の三つの成分 p'_x, p'_y, p'_z によって決まり，直交規格化関係と完全性関係

$$\delta(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'') \equiv \delta(p'_x - p''_x)\,\delta(p'_y - p''_y)\,\delta(p'_z - p''_z) = \langle \boldsymbol{p}' | \boldsymbol{p}'' \rangle$$

$$P_p \equiv \int |\boldsymbol{p}'\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{p}' \langle \boldsymbol{p}' | = 1$$

を満たす．表現 $\{\boldsymbol{r}\}$ の行列から表現 $\{\boldsymbol{p}\}$ の行列への変換を表わす行列 S は

$$\langle \boldsymbol{p}' | \boldsymbol{r}' \rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{r}')/\hbar}.$$

したがって，表現 $\{\boldsymbol{p}\}$ における $V(\boldsymbol{r})$ の行列要素は具体的に

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{p}' | V | \boldsymbol{p}'' \rangle &= \iint \langle \boldsymbol{p}' | \boldsymbol{r}' \rangle \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}' | V(\boldsymbol{r}) | \boldsymbol{r}'' \rangle \mathrm{d}\boldsymbol{r}'' \langle \boldsymbol{r}'' | \boldsymbol{p}'' \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \iint \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{r}')/\hbar}\, \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\, V(\boldsymbol{r}')\, \delta(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}'')\, \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}'' \cdot \boldsymbol{r}'')/\hbar} \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int V(\boldsymbol{r}')\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'') \cdot \boldsymbol{r}'/\hbar}\, \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\end{aligned}$$

と書かれる．ここで

$$\mathcal{V}(\boldsymbol{\varpi}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int V(\boldsymbol{r})\, \exp\{-\mathrm{i}\,(\boldsymbol{\varpi} \cdot \boldsymbol{r})/\hbar\} \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

と置けば，

$$\langle \boldsymbol{p}' | V | \boldsymbol{p}'' \rangle = \mathcal{V}(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'')$$

となり，表現 $\{p\}$ における演算子 H の行列要素は

$$\langle p' | H | p'' \rangle = \frac{p'^2}{2m}\delta(p'-p'') + \mathcal{V}(p'-p'').$$

力学的状態 $|\phi\rangle$ の普通の意味での波動関数は $\Psi(r')$ であるが，運動量空間における波動関数を $\Phi(p')$ で表わす．すなわち

$$\Phi(p') = \langle p' | \phi \rangle = \int \langle p' | r' \rangle \mathrm{d}r' \langle r' | \phi \rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p'\cdot r')/\hbar}\,\Psi(r')\,\mathrm{d}r'.$$

波動力学において

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r;t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(r)\right]\Psi(r;t)$$

と書かれるシュレーディンガー方程式は，表現 $\{p\}$ においては積分－微分方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(p;t) = \frac{p^2}{2m}\Phi(p;t) + \int \mathcal{V}(p-p')\,\Phi(p';t)\,\mathrm{d}p'$$

の形をとる．

§18.　例：自由波束の運動

上に述べた考察の応用として，自由波束の運動 ($V=0$) を調べよう．

時刻 $t=0$ における状態ベクトルを $|\phi\rangle$ で表わし，このベクトルを表現 $\{r\}$ および $\{p\}$ において表わす波動関数をそれぞれ $\phi(r)$，$\varphi(p)$ とする．時刻 t において，この系の力学的状態はベクトル

$$|\Psi\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\,|\phi\rangle$$

によって与えられる．ここで $H=p^2/2m$ はこの自由粒子のハミルトニアンである．運動量は運動の定数であるから，その平均値は時刻が経過しても一定値を保つ．同じことが群速度

$$v = \langle p \rangle / m$$

についても言える．

すでに学んだように（第6章，§3），t が十分に小さいとき，波束の拡散は無視される範囲にある．この結果をもっと詳しく述べ，拡散が無視されるという条件の下では，波束が実際上形を崩さずに伝わり，きわめて良い近似で関数

$$\phi(r-vt)$$

と同一視されることを示そう．

この近似波動関数はベクトル

$$|\overline{\Psi}\rangle \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p\cdot v)t/\hbar}\,|\phi\rangle$$

を表わす．このことを確かめるのは，性質 (16) を利用し一般化してもできるし，表現 $\{p\}$ において対応する波動関数を調べてもできる．系の状態 $|\overline{\Psi}\rangle$ にある確率が1に近い

ほど，それだけこの近似は良くなる．言いかえれば，

$$1-|\langle \Psi | \overline{\Psi} \rangle|^2 \ll 1$$

が成り立たなければならない．$|\Psi\rangle$ と $|\overline{\Psi}\rangle$ に上記の式を代入すると，

$$|\langle \Psi | \overline{\Psi} \rangle| = \left| \langle \phi | \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{(p-mv)^2}{2m}t\right) | \phi \rangle \right|$$

を得る．

右辺の行列の要素は，表現 $\{p\}$ で計算すると特に簡単になる．すなわち

$$\langle \phi | \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{(p-mv)^2}{2m}t\right) | \phi \rangle = \int |\varphi(p)|^2 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p-mv)^2 t/2m\hbar} \, \mathrm{d}p.$$

波束 $\varphi(p)$ が4•1図に示された型のものであるとすれば，この関数は平均値 $p=mv$ のまわりに1次元のひろがりが Δp の顕著なピークを示す．ここで Δp は粒子の運動量の標準偏差を表わすベクトル $\Delta \boldsymbol{p}$ の長さである．この仮定の下に，

$$(\Delta p)^2 t/2m\hbar \ll 1,$$

すなわちまた

$$\frac{\Delta p}{m} t \ll \frac{2\hbar}{\Delta p}$$

が成り立つ限り，右辺の指数関数はこのピークの全領域において1にきわめて近い値を保つ．したがってこの条件が満たされるとき近似は十分に正しい．ところでこの正当化の条件は，条件

拡散 ≪ 幅

にほかならない．これは第6章 §3で波束の拡散を学んだ際に定めたものである（第6章の条件 (15)）．

§19. その他の表現．エネルギーを対角型にする表現

先に述べた例からわかるように，この理論のいろいろな方程式は，どの表現を採用するかによってたいそう違った形をとる．したがって計算の手順も一つ一つの表現によって大きく変わりうる．

量子論のいろいろな表現のうちいくつかのものは，シュレーディンガー方程式がきわめて簡単な形をとるという理由で，保存系を取り扱うとき特に有用であることが明らかにされる．それはエネルギー H を対角型にするものである[9]．このような表現の基底ベクトル $|E\alpha\rangle$ はエネルギーの固有値 E と，他の運動の定数の固有値の集合 α によって特徴づけられる．ただし，これらの運動の定数は H とともに基底オブザーバブルの全体を構

---

[9] もとの形で言えば，ボルン，ハイゼンベルク，ヨルダンの行列力学は，ハイゼンベルク表示による量子論の特殊な定式化であり，エネルギーを対角型にする表現で言い表わしたものであった．

成するものである．ベクトル $|\psi(t)\rangle$ はシュレーディンガー表示における系の力学的状態を表わし，また《波動関数》

$$\psi(E,\alpha;t)=\langle E\alpha|\psi(t)\rangle$$

によって表わされる．これはシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(E,\alpha;t)=\langle E\alpha|H|\psi(t)\rangle=E\psi(E,\alpha;t)$$

を満たす．それゆえ簡単に

$$\psi(E,\alpha;t)=\psi(E,\alpha;t_0)\,e^{-iE(t-t_0)/\hbar}$$

が得られる．

したがって量子系の力学的状態を表わすベクトルの時間的変化を知ることは，初期時刻におけるその表現 $\{E\alpha\}$ を知ればきわめてやさしい．実際にはこのベクトルの初めの位置が別の表現，たとえば $\{q\}$ における成分によって与えられることが多い．そのときには，表現 $\{q\}$ から H を対角型にする表現へ移ることができれば，運動方程式を解くことができる．数学的には，表現の変更を表わすユニタリ行列の構成は表現 $\{q\}$ における H の固有値問題と同値な問題である．すなわち，時間を含まないシュレーディンガー方程式をこの表現において解くことに同値である．

IV. 量子統計

§20. 完全には知られない系と統計的混合

量子系の力学的状態が完全には知られないときでも，統計力学に慣用の方法に訴えれば，系の挙動に関していくつかの予想をすることができる．このことについて第5章(§16)で準備した議論は容易にわれわれの新しい言葉に翻訳される．

量子系の力学的状態が完全に知られるのは，この系に結びついた共立する変数の完全集合の一組につき，各変数値を厳密に定めることが首尾よくできた場合である．そのとき状態はあるベクトル $|\ \ \rangle$ で表わされる．

系に関してわれわれのもつ情報が不完全であるときは，それぞれケットベクトル $|1\rangle$, $|2\rangle,\cdots,|m\rangle,\cdots$ で表わされる力学的状態に系が見いだされるために，系はある確率 p_1, $p_2,\cdots,p_m,\cdots$ をもつということで満足する．言いかえると，系の力学的状態を表わすものは，もはやただ一つのベクトルではなく，多くのベクトルの統計的混合でなければならない．

この系に対してある量 A の測定を行なったとする．測定結果の平均値 $\langle A\rangle$ が $\langle A\rangle_m$

$=\langle m|A|m\rangle/\langle m|m\rangle$ に等しくなる確率は p_m である．それゆえ，ベクトル $|1\rangle$, $|2\rangle,\cdots,|m\rangle,\cdots$ が1に規格化されているとすれば，

$$\langle A\rangle=\sum_m p_m\langle m|A|m\rangle \tag{62}$$

と書くことができる．A を任意の関数 $F(A)$ にかえれば，$F(A)$ の平均値も同じ式で与えられる．これから容易に A の測定結果の統計的分布が導かれる．

§21. 密度演算子 (10)

いま定義したばかりの統計的混合系を記述するには，演算子

$$\rho=\sum_m |m\rangle p_m\langle m| \tag{63}$$

を用いると特につごうがよい．この式において，ベクトル $|m\rangle$ は1に規格化されており（しかし直交していることは必要でない），量 p_m は統計的な重さに特有の性質をもつ．すなわち，

$$p_m\geqslant 0,\qquad \sum_m p_m=1. \tag{64}$$

演算子 ρ は**密度演算子**または**統計演算子**と呼ばれている．

オブザーバブル A の平均値は ρA の跡である．

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}\,\rho A. \tag{65}$$

実際，

$$\mathrm{Tr}\,\rho A=\sum_m p_m\,\mathrm{Tr}\,(|m\rangle\langle m|A)$$

であるから，(62) と (65) が等しいことを示すには，

$$\mathrm{Tr}\,(|m\rangle\langle m|A)=\langle m|A|m\rangle$$

を言えばよい． ところが $P_m\equiv|m\rangle\langle m|$ は1に等しい跡をもつ射影子であり（第7章 (88)），したがって

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,P_m A=\mathrm{Tr}\,P_m^2 A=\mathrm{Tr}\,P_m A P_m&=\mathrm{Tr}\,|m\rangle\langle m|A|m\rangle\langle m|\\&=\langle m|A|m\rangle\,\mathrm{Tr}\,P_m=\langle m|A|m\rangle.\end{aligned}$$

同じ証明を $A=1$ という特別な場合に適用すると，規格化条件

$$\mathrm{Tr}\,\rho=1$$

が得られる．この議論はオブザーバブル A の任意の関数に対してもそのまま適用され，結果は

---

(10) 密度演算子の性質に関するごく完全な解説は U. Fano, Description of States of Quantum Mechanics and Operator Techniques, *Rev. Mod. Phys.*, **29**, 74 (1957) によって与えられている．

$$\boxed{\langle F(A)\rangle = \mathrm{Tr}\,\rho F(A)}$$

となる．それゆえ ρ を知れば，これから A の測定結果の統計的分布を導き出すことができる．

ごく一般に，A のスペクトルのうち，ある領域 D に含まれる固有値だけを考え，これらに対応する A の固有ベクトルによって張られる部分空間への射影子を P_D とすれば，測定結果が領域 D に現われる確率 w_D は $\sum_m p_m\langle m|P_D|m\rangle$ ((5) を参照)，すなわち

$$\boxed{w_D = \mathrm{Tr}\,\rho P_D} \tag{66}$$

である．特に，(ノルム1の) ベクトル $|\chi\rangle$ で表わされる量子的状態に系が見いだされる確率は

$$w_\chi = \mathrm{Tr}\,(\rho|\chi\rangle\langle\chi|) = \langle\chi|\rho|\chi\rangle. \tag{67}$$

測定可能なすべての物理量，平均値，および測定値の統計的分布を計算するには ρ を与えるだけで十分であるから，今後は同じ密度関数をもつ二つの統計的混合系は同じものとみなす．量子的統計的混合系はそれぞれその密度演算子によって正確にまた完全に定められる．

§2 の要請を統計的混合系に拡張するために残されていることは，測定が終ったときどんな密度演算子が系の力学的状態を表わすかを正確に定めることである．§2 のときのように，理想測定の場合に限ろう．この系に施された測定の結果，系は上に定めた領域 D に現われる A の固有状態にあることが示されたならば，測定後の密度演算子は，規格化の定数を除いて $P_D\rho P_D$，すなわち測定前にこの統計的混合系を表わした演算子 ρ の射影である．定数はこの演算子が1に等しい跡をもつという条件によって定められる．したがってそれは $\mathrm{Tr}\,P_D\rho P_D = \mathrm{Tr}\,\rho P_D = w_D$ という量の逆数である．それゆえ，測定の過程で密度演算子のうける (非因果律的な) 変化は，結局つぎの図式に一致する(11)．

$$\boxed{\rho \longrightarrow \text{結果 } D \text{ を与える理想測定} \longrightarrow \frac{P_D\rho P_D}{\mathrm{Tr}\,\rho P_D}}$$

§22. 統計的混合系の時間的変化

まず初めに，シュレーディンガー表示で考えよう．時刻 t_0 に系の力学的状態が (ノル

(11) 波束の収縮に関する要請のこのような拡張を正当化するためには，量子力学における測定の機構についての詳細な研究を参照する必要がある．この問題については第4章の注 (10) に掲げた文献を見よ．また U. FANO，前掲論文(281頁参照)を見よ．

ム1の）ベクトル $|1\rangle_0, |2\rangle_0, \cdots, |m\rangle_0, \cdots$ の混合によって表わされ，各ベクトルには統計的な重さ $p_1, p_2, \cdots, p_m, \cdots$ が結びついているとする．混合の各成分は法則

$$|m\rangle_t = U(t, t_0)\,|m\rangle_0$$

にしたがって時間的に変化し，系は時刻 t においてベクトル $|1\rangle_t, |2\rangle_t, \cdots, |m\rangle_t, \cdots$ の混合によって表わされ，各ベクトルに結びつく統計的な重さ $p_1, p_2, \cdots, p_m, \cdots$ は，それぞれ初期の混合において各ベクトルに結びついていたものと同じである．$U(t, t_0)$ は §8で定義された時間的変化のユニタリ演算子である．

これから密度演算子の変化に関する因果法則

$$\begin{aligned}\rho_t &= \sum_m |m\rangle_t\, p_m\, {}_t\langle m| = \sum_m U(t, t_0)\,|m\rangle_0\, p_m\, {}_0\langle m|\, U^\dagger(t, t_0)\\ &= U(t, t_0)\Bigl(\sum_m |m\rangle_0\, p_m\, {}_0\langle m|\Bigr)U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0)\,\rho_0 U^\dagger(t, t_0)\end{aligned}$$

が導かれる．時刻 t における密度演算子は初期時刻 t_0 における密度演算子からユニタリ変換 $U(t, t_0)$ によって導き出される．

演算子 U の変化の方程式（式（32））とそのエルミート共役を考慮すれば，

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_t = [H, \rho_t] \tag{68}$$

となる．これが密度演算子のシュレーディンガー方程式である．この方程式とハイゼンベルク方程式（40）とは形の上で似ている——交換子の符号しか違わない——けれども，両者を混同してはならない．ここに現われる量はシュレーディンガー表示の演算子である．

シュレーディンガー表示からハイゼンベルク表示へはユニタリ変換 $U^\dagger(t, t_0)$ によって移る．したがって，密度演算子はハイゼンベルク表示においては動かない（$\rho_H = \rho_0$）．しかし，物理量はハイゼンベルク方程式（40）にしたがって時間的に変化するオブザーバブルによって表わされる．

§23. 密度演算子の特性

密度演算子 ρ は正の定符号で（第7章 §8を参照）1に等しい跡をもつ演算子である．実際，ρ の定義そのもの（式（63））により，どんな $|u\rangle$ に対しても

$$\langle u|\rho|u\rangle = \sum_m p_m |\langle u|m\rangle|^2 \geqslant 0 \tag{69}$$

$$\mathrm{Tr}\,\rho = \sum_m p_m\, \mathrm{Tr}\,(|m\rangle\langle m|) = \sum_m p_m = 1 \tag{70}$$

が得られる．

さらに，p_m はすべて正〔または0〕で，

$$|\langle u|m\rangle|^2 \leqslant \langle u|u\rangle \qquad \text{（シュワルツの不等式）}$$

であるから，

$$\langle u|\rho|u\rangle \leqslant \langle u|u\rangle. \tag{71}$$

言いかえると，演算子 $(1-\rho)$ も正の定符号である．

逆に，正の定符号で跡1をもつエルミート演算子 ρ はすべて密度演算子とみなすことができる．実際，これは一つのオブザーバブルであり，その0でない固有値を $\varpi_1, \varpi_2, \cdots, \varpi_n, \cdots$ で表わし，その部分空間への射影子をそれぞれ $P_1, P_2, \cdots, P_n, \cdots$ とすれば，

$$\rho = \sum_n \varpi_n P_n \tag{72}$$

と書くことができる．どの固有値にも縮退がないとき，各 P_n は素射影子 $P_n = |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}|$ であり，

$$\rho = \sum_n \varpi_n |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}| \tag{73}$$

となる．$\sum_n \varpi_n = \mathrm{Tr}\,\rho$, $\varpi_n = \langle\bar{n}|\rho|\bar{n}\rangle \geqslant 0$ であるから，ϖ_n は確かに統計的な重さの性質

$$\varpi_n \geqslant 0, \qquad \sum_n \varpi_n = 1$$

をもつ．したがって ρ は，それぞれ重さ ϖ_n をつけられたベクトル $|\bar{n}\rangle$ から成る混合の密度演算子である[12]．ρ の固有値のうちのいくつかが縮退している場合にこの証明を拡張することは読者に任せる．

§24. 純粋な場合

密度演算子の形式論によって，統計的混合系という特殊な場合と同様に，純粋な場合も取り扱われる．

系が純粋な状態 $|\chi\rangle$ にあることが確実ならば，この系は（ノルムを1とした）$|\chi\rangle$ をただ一つの要素としてもつ統計的混合系によって表わされる．その密度演算子は射影子

$$\rho_\chi = |\chi\rangle\langle\chi| \tag{74}$$

であり，

$$\rho_\chi^2 = \rho_\chi \tag{75}$$

が成り立つ．

逆に，密度演算子が射影子であるならば，それは純粋な状態を表わす．射影が落とされるベクトルがその状態を表わす．

密度演算子 ρ が純粋な状態を表わすかどうかを知るためには，なお二つの判定法が与えられる．

---

(12) 式 (73) において，$|\bar{n}\rangle$ は互いに直交する．これに反して，定義 (63) に現われる $|m\rangle$ は必ずしもこの性質をもたない．

1° 密度演算子 ρ を射影子の線形結合の形に表わす方法は幾通りもある．(63) の表わし方はただ一つではない．しかし (63) によって定められる演算子 ρ が純粋な状態を表わすためには，すべての $|m\rangle$ が位相を除いて等しいことが必要（そして十分）である．このときそれらの $|m\rangle$ は同一の力学的状態を表わし，これが求める純粋な状態である（問題7）．

2° すべての密度演算子 ρ——すなわち正の定符号で跡1をもつすべてのエルミート演算子——は $\mathrm{Tr}\,\rho^2 \leqslant 1$ という性質をもつ．これが純粋な場合を表わすためには，

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1 \tag{76}$$

であることが（必要そして）十分である（問題8）．

結局，系の力学的状態が完全に知られていても不完全にしか知られていなくても，この系をその密度演算子によって表わすことはつねに可能である．この演算子を与えることによって，量子論が提供しうる物理的に測定可能な量はすべて実際に決定することができる．(66) が果たす役割は，状態を表わすためにベクトルを用いるとき（5）が果たす役割と同じである．この取り扱い方のもつ利点は，純粋な場合と混合の場合に対して同一の処理法を提供するということである．その上，系の純粋な状態を表わすベクトルはどうしても位相因子を除いてしか定まらないし，不完全にしか知られない力学的状態を表わすベクトルの混合を定めるときには，さらにずっと多くの任意性によってわずらわされるのに対して，状態を表わす密度演算子は一意的に定められる．

§ 25. 古典統計力学と量子統計力学

古典力学においては，一つの力学的状態が位相空間の一点によって定められ，状態の統計的混合は位相空間内の流体によって表わされる．一点における流体の密度 $\rho_{\mathrm{cl.}}$ は，この点によって定まる状態に系を見いだす確率に等しい．

位相内の密度 $\rho_{\mathrm{cl.}}$ と量子論の密度演算子 ρ とのあいだにはいちじるしい平行性がある．$\rho_{\mathrm{cl.}}$ は実の正〔または0〕の量であり，位相空間全体におけるその積分は1に等しい．すなわち

$$\iint \rho_{\mathrm{cl.}}\,\mathrm{d}q\,\mathrm{d}p = 1. \tag{77}$$

一方，ρ はエルミート演算子であり，その固有値はすべて正〔または0〕であって（正の定符号演算子），その跡は1に等しい．

与えられた時刻における $\rho_{\mathrm{cl.}}$ を知れば，力学変数 q と p のどんな関数 $A_{\mathrm{cl.}}$ についても，その平均値 $\langle A\rangle_{\mathrm{cl.}}$ が導かれる．それには $\rho_{\mathrm{cl.}}A_{\mathrm{cl.}}$ を位相空間全体で積分すればよ

い：

$$\langle A\rangle_{\mathrm{cl.}}=\iint\rho_{\mathrm{cl.}}A_{\mathrm{cl.}}\,\mathrm{d}q\,\mathrm{d}p. \tag{78}$$

$\rho_{\mathrm{cl.}}$ の時間的変化は方程式

$$\frac{\partial\rho_{\mathrm{cl.}}}{\partial t}=\{H_{\mathrm{cl.}},\rho_{\mathrm{cl.}}\} \tag{79}$$

によって与えられる（この方程式を (42) と混同してはならない).

(78) と (79) はそれぞれ (65) と (68) に対する古典的類似である．古典理論の式から量子論の式に移るには，ふつうの量をオブザーバブルに，ポアッソン括弧式を（係数 $i\hbar$ をつけて）交換子に，位相空間全体にわたる積分を跡に置き換えればよい．

対応原理に対するこの新しい言い表わし方は，古典統計熱力学の基本的な諸結果を量子の領域に拡張しようとするとき，きわめて貴重なものになる．古典的な議論は大部分そのまま言いなおされる．ここでは主な結果を指摘するだけにしておく．

温度 T において熱力学的平衡にある量子系の状態は演算子

$$\rho=N\,\mathrm{e}^{-H/kT} \tag{80}$$

によって表わされる．H は系のハミルトニアン，k はボルツマン定数である．N は $\mathrm{Tr}\,\rho=1$ となるように調整された規格化の定数である．このような系のいろいろな熱力学的関数は，古典理論のときと同じように，状態和

$$Z(\mu)=\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\mu H} \tag{81}$$

を用いて計算される．たとえば，自由エネルギー $\mathcal{F}$，エントロピー S，エネルギー E は，$\mu=1/kT$ を用いて書くとき，それぞれつぎの式によって与えられる．

$$\mathcal{F}=-kT\log Z \tag{82}$$

$$S=k\left(\log Z-\mu\frac{\partial}{\partial\mu}\log Z\right) \tag{83}$$

$$E=\langle H\rangle=-\frac{\partial}{\partial\mu}\log Z. \tag{84}$$

もっと一般に，一つの系のエントロピーは，対応原理にしたがい，演算子 $-k\log\rho$ の平均値によって与えられる．言いかえると

$$S=-k\,\mathrm{Tr}\,(\rho\log\rho). \tag{85}$$

これから平衡分布 (80) を導き出すのは容易である．これはエネルギーの平均値が与えられたとき，エントロピーを最大にする分布である．

演 習 と 問 題

1.　平均値に関する基本的要請から，与えられた量の測定結果の確率法則を与える(5)を導け．

2.　1次元の類似古典系をもつ量子系を考える．交換関係 $[q, p] = \mathrm{i}\hbar$ から，p のスペクトルはまったく縮退がなく，連続で，$-\infty$ から $+\infty$ までひろがっていることを導け．適当に規格化された p の固有ベクトルは $\mathcal{E}$ の完全直交規格化系をつくる．この系のベクトル $|p'\rangle$ の位相を適当に選ぶならば，これらのベクトルに対するユニタリ演算子 $\exp(\mathrm{i}\varpi q/\hbar)$ (ϖ は任意の定数) の作用は

$$\exp(\mathrm{i}\varpi q/\hbar)\,|p'\rangle = |p'+\varpi\rangle$$

となることを示せ．また，演算子 q は行列要素

$$\langle p'|q|p''\rangle = \mathrm{i}\hbar\,\delta'(p'-p'')$$

をもつことを示せ．この表現において q の固有値問題を解け．

3.　連続なパラメータ ξ に直接に依存する演算子 $A(\xi)$ の導関数は

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{A(\xi+\varepsilon)-A(\xi)}{\varepsilon}$$

であると定義する．つぎのことを示せ．

1°　$A(\xi)$ が一つのオブザーバブルまたは交換するいくつかのオブザーバブルの関数であるとき，その導関数は普通の微分法の規則によって得られる．特に O が一つのオブザーバブルであるとき，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}O\xi}) = \mathrm{i}\,O\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}O\xi}.$$

2°　二つの演算子 A, B が微分可能であるとき，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(AB) = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi}B + A\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}\xi}.$$

特別な場合として

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}A^2 = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi}A + A\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi}.$$

3°　A が微分可能で逆をもつとき，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}A^{-1} = -A^{-1}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi}A^{-1}.$$

4.　A と B_0 が t に無関係な演算子であるとき，式

$$B(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}At}B_0\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}At}$$

によって定められる演算子は，積分方程式

$$B(t) = B_0 + \mathrm{i}\left[A, \int_0^t B(\tau)\,\mathrm{d}\tau\right]$$

の解であることを示せ.

この方程式を反復 (itération) によって解けば, t のべき級数による $B(t)$ の展開が得られる. これから演算子間の恒等式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}A} B \mathrm{e}^{-\mathrm{i}A} = B + \mathrm{i}[A, B] + \frac{\mathrm{i}^2}{2!}[A, [A, B]] + \cdots + \frac{\mathrm{i}^n}{n!} \underbrace{[A, [A, \cdots, [A, [A, B]] \cdots]]}_{n \text{個の括弧}} + \cdots$$

を導け.

(注意; $[A, B]$ を A が B に作用した結果として生じる演算子とみなすことにし, この演算子を $A\{B\}$ で表わそう. こうすれば $A^n\{B\}$ は A を n 回繰り返した作用を表わす. この記号によれば,

$$A^0\{B\} \equiv B, \quad A\{B\} \equiv [A, B], \quad A^2\{B\} \equiv [A, [A, B]], \text{ など}$$

となり, 上の恒等式は簡単に

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}A} B \mathrm{e}^{-\mathrm{i}A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathrm{i}^n}{n!} A^n\{B\}$$

と書かれる).

5. $A(\xi)$ は連続なパラメータ ξ に依存する演算子であり, $\mathrm{d}A/\mathrm{d}\xi$ は ξ に関する A の導関数であるとする. 演算子間の恒等式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}A} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}A}) = \mathrm{i} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\mathrm{i})^n}{(n+1)!} A^n \left\{\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi}\right\}$$

を証明せよ (問題4の注意で述べた記号).

6. t に関して微分可能な演算子 $U(t)$ がユニタリならば, 演算子

$$H(t) \equiv \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} U^\dagger$$

は必ずエルミートである.

逆に, H が t に依存してもよいエルミート演算子であるとき, $U(t)$ が方程式

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U(t) = HU$$

を満たすならば, $U^\dagger U$ は t に無関係であり, $UU^\dagger$ は方程式

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} UU^\dagger = [H, UU^\dagger]$$

の解である. 特に, U が $t = t_0$ のときユニタリならば, t のどんな値に対してもユニタリである.

7. $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |M\rangle$ は必ずしも直交しないノルム1のベクトルの列とする. 密度演

算子 $\rho=\dfrac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}|i\rangle\langle i|$ が純粋な場合を表わすために必要十分な条件は，これら M 個のベクトルが位相を除いて等しいということである．このことを示せ．

8. 定符号エルミートで跡が1の演算子 ρ が純粋な場合を表わすためには，$\mathrm{Tr}\,\rho^2=1$ が必要十分であることを示せ．

付録 A

超関数，δ《関数》およびフーリエ変換

目　次

I．超関数についての簡単な知識[1]

§1. 汎関数の概念と連続スペクトルの厳密な取り扱い

ディラックの δ《関数》を使うことによって連続スペクトルをとびとびのスペクトルと同じように取り扱うことができるけれども，これははっきり定義された数学的対象ではない．連続スペクトルをもつオブザーバブルを厳密な形で理論に導入しようとすれば，固有値問題を違った形で立てなければならない．

実際に波動力学におけるオブザーバブルの固有関数は，それらと波動関数との内積，すなわち二乗積分可能な関数との内積を通して入ってくるだけである．このような固有関数の一つを F とし，任意に選んだ波動関数を ψ とする．内積 $\langle \psi, F \rangle$（第5章の記号）は ψ の反線形汎関数，あるいはもっとうまく言えば，ψ^* の線形汎関数とみなすことができる．後者を $\hat{F}$ で表わそう．定義により

$$\hat{F}[\psi] = \langle \psi^*, F \rangle.$$

理論に入ってくるのは，こうして固有関数に結びつけられた汎関数であり，固有関数そのものではない．

さて，これらの汎関数は超関数（distribution）と呼ばれる一群の汎関数に属する．超関数に対しては，いくつかの点を保留すれば，関数に対して定められているのと同じ代数的・解析的演算を定義することができる．それゆえ，波動力学の理論における演算子を，関数に作用するものではなく，超関数に作用する演算子として定義することにより，波動力学を厳密に再構成することができる．このときエルミート演算子の固有解は特別な超関数となる．これは二乗積分可能な有界関数の線形連続汎関数で，この演算子の固有方程式を満たすものである．

もっと一般に，X と Ξ を二つのオブザーバブルとし，話を簡単にするため，これらのスペクトルは完全に連続で縮退がないとし，表現 $\{X\}$ から表現 $\{\Xi\}$ へ移行させるユニタリ変換の行列を $\langle \xi | x \rangle$ とする．量子論の厳密な定式化の際，$\langle \xi | x \rangle$ はつぎの二つを同時に表わす：

i) 表現 $\{\Xi\}$ における X の固有解の全体，すなわち ξ の関数に作用するある一連の汎関数で，添数 x によって区別されるもの．

---

[1] L. SCHWARTZ, *Théorie des Distributions*, Hermann, Paris, 1950—1951（邦訳；シュワルツ《超関数の理論》岩村聯訳，岩波書店）を参照．また同じ著者の *Les Méthodes Mathématiques de la Physique*, Cours de Sorbonne, Paris, 1955 を見よ．

ii) 表現 $\{X\}$ における Ξ の固有解の全体，すなわち x の関数に作用するある一連の汎関数で，添数 ξ によって区別されるもの．

この節では超関数の正確な定義を与え，その主な性質を証明なしに述べる．

§2. 超関数の定義

$\varphi(x_1, \cdots, x_n)$ あるいはもっと簡単に $\varphi(x)$ によって，n 個の連続な変数 $x_1, \cdots, x_n$ の関数を表わし，この関数 φ が0でない値をとるような変数 x の範囲は，ある有界な領域にまったく含まれており，φ はこれらの変数に関して各階の導関数をすべてもつとする（有界なささえをもつ無限回微分可能な関数）．

超関数 $T[\varphi]$ とは関数 φ の線形連続汎関数であると定義する．

線形であるとは，任意の線形結合 $\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2$ に対して

$$T[\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2] = \lambda_1 T[\varphi_1]+\lambda_2 T[\varphi_2]$$

が成り立つという意味であり，連続であるとは，$\lim_{j\to\infty} \varphi_j = \varphi$ となるような任意の列 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_j, \cdots$ に対して

$$\lim_{j\to\infty} T[\varphi_j] = T[\varphi]$$

が成り立つという意味である．

局所積分可能な——すなわち任意の有限区間において積分[2]をもつ——任意の関数 f には，内積

$$\hat{f}[\varphi] = \int f(x)\,\varphi(x)\,\mathrm{d}x = \langle \varphi^*, f\rangle \tag{1}$$

によって定まる一つの超関数 $\hat{f}$ が対応する．二つの局所積分可能な関数がほとんどいたるところで（すなわち測度0の集合を除けばいたるところで）等しいとき，同じ超関数を定める．特に波動力学の波動関数（二乗積分可能な関数）は超関数を定める．

関数 $1/x$ にはけっして超関数が対応しない．この関数は点 $x=0$ を含む区間において積分可能ではないからである．しかし超関数

$$\mathrm{PP}\frac{1}{x}[\varphi] \equiv \mathrm{PP}\int \frac{\varphi(x)}{x}\,\mathrm{d}x \tag{2}$$

は定義される．ただし PP はその右にある積分において，コーシーの主要部をとる意味である．すなわち

---

[2] この理論の全体で問題になる積分はルベッグの意味における積分である．普通の意味での積分すなわちリーマン積分が意味をもつときはいつでもルベッグ積分はリーマン積分に等しくなる．しかしリーマン積分が定められない場合でも，ルベッグ積分が存在することはありうる．

$$\mathrm{PP}\int_{-\infty}^{+\infty} = \lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{+\infty}\right\}.$$

《ディラックの関数》$\delta(x)$ は超関数

$$\delta[\varphi] = \varphi(0) \tag{3}$$

を定める．同様に，《関数》$\delta(x-x_0)$ は超関数

$$\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0) \tag{4}$$

を定める．

注意：たまたま，関数 φ のつくる空間より広い関数空間において超関数が定義されてもよい．実際，関数 φ のつくる空間よりも広い関数空間の関数 ϕ に対して線形連続汎関数 $U[\phi]$ が定義されれば，φ のつくる空間においても $U[\varphi]$ ははっきり定められ，線形連続である．すなわち U は超関数である．

例． δ_{x_0} は $x=x_0$ において連続な関数 $\alpha(x)$ のつくる空間で定義される：

$$\delta_{x_0}[\alpha] = \alpha(x_0).$$

二乗積分可能な関数 Ψ に対応する超関数 $\hat{\Psi}$ は，二乗積分可能な関数 $\phi(x)$ のつくる空間で定義される．すなわち

$$\hat{\Psi}[\phi] = \int \Psi\phi\,\mathrm{d}x = \langle\phi^*, \Psi\rangle.$$

波動力学の波動関数に対する線形連続汎関数は超関数の特殊な場合である．

§3. 超関数の線形結合

$T = \lambda_1 T_1 + \lambda_2 T_2$ は

$$T[\varphi] = \lambda_1 T_1[\varphi] + \lambda_2 T_2[\varphi]$$

によって定められる超関数とする（λ_1, λ_2 は任意の複素定数）．

§4. 二つの超関数の積

$\hat{f}$ が局所積分可能な関数 f に結びついた超関数で，T が任意の超関数であるとき，もし T が関数 $f\varphi$ に対する線形連続汎関数ならば，超関数

$$P = \hat{f}T$$

が，定義

$$P[\varphi] = T[f\varphi] \tag{5}$$

によってはっきり定められる．

二つの超関数の積は<u>必ずしも存在しない</u>. f が各階の導関数をもつならば，どんな T に対しても $\hat{f}T$ が存在する．f が点 x_0 において連続ならば，

$$\hat{f}\,\delta_{x_0}[\varphi] = f(x_0)\,\varphi(x_0). \tag{6}$$

f と g が二乗積分可能ならば，積 $\hat{f}\hat{g}$ ははっきり定まる．これに反して $[\delta(x)]^2$ は何の意味ももたない．$(1/\sqrt{|x|})^2$ も同様である．

（6）の特別な場合として，関係式

$$x\,\delta(x) = 0 \tag{7}$$

が成り立つ．逆に，$xT = 0$ ならば，T は δ の何倍かである：$T = c\delta$（c は定数)．

したがって，$f(x)$ と $g(x)$ が

$$xf(x) = g(x)$$

という関係で結ばれているならば，必ず

$$f(x) = \mathrm{PP}\,\frac{g(x)}{x} + c\,\delta(x) \tag{8}$$

が成り立つ．ここで c はまだ決まらない定数である．

§5. 超関数の級数と積分

超関数の列 $T_1, T_2, \cdots, T_j, \cdots$ が与えられたとする．任意の φ に対して，$j\to\infty$ のとき $T_j[\varphi]$ が極限をもつならば，この極限はつぎのような一つの超関数（すなわち関数 φ の線形連続汎関数）である：

$$T = \lim_{j\to\infty} T_j.$$

これと同値な言い方であるが，どんな φ に対しても無限級数 $\sum_i T_i[\varphi]$ が収束するならば，その和は超関数を定める．このとき超関数の<u>級数</u> $\sum_i T_i$ は<u>収束する</u>という．

$T(\lambda)$ がパラメータ λ によって決まる超関数で，λ は領域 Λ を連続的に動くものとし，積分

$$I[\varphi] = \int_\Lambda T(\lambda)\,[\varphi]\,\mathrm{d}\lambda$$

がどんな φ についても収束するならば，この積分は一つの超関数

$$I = \int_\Lambda T(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda$$

を定める．

重積分についても定義は同様である．

特に $f(x,\lambda)$ が x について（局所的に）も λ についても積分可能であるとき，超関数

$\hat{f}(\lambda)$ は λ について積分可能であり，その積分は関数

$$g(x)=\int f(x,\lambda)\,\mathrm{d}\lambda$$

に結びついた超関数 $\hat{g}$ である．

関数 $a(k)$ が $|k|\to\infty$ のとき k のある正のべきによって上から押さえられるとき，すなわち

$$|a(k)|\leqslant A\,|k|^{\alpha}\qquad (A \text{ と } \alpha \text{ は正の定数})$$

であるとき，積分 $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,a(k)\,\mathrm{d}k$ は超関数である．

特に，
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k=2\pi\,\delta.$$

§6. 超関数の導関数

超関数 T の導関数 $\partial T/\partial x_i$ をつぎのように定義する：

$$\frac{\partial T}{\partial x_i}[\varphi]=-T\left[\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\right]. \tag{9}$$

特に局所積分可能な関数が連続的に微分可能であるとき，対応する超関数の導関数は，導関数に対応する超関数である．実際，部分積分法により

$$\hat{f}'[\varphi]=\int f'(x)\,\varphi(x)\,\mathrm{d}x=-\int f(x)\,\varphi'(x)\,\mathrm{d}x=-\hat{f}[\varphi'].$$

関数の導関数の性質はすべて超関数にもあてはまる．たとえば積 $P=\hat{f}T$ の導関数は

$$P'=\hat{f}'T+\hat{f}T'. \tag{10}$$

さらに，多少とも制限された範囲の関数について成り立ついくつかの結果が，すべての超関数に対して無制限に適用される．それはつぎのような結果である．

1°　超関数は各階の導関数をもつ．

特に局所積分可能な関数

$$\log|x|,\qquad 1/r\qquad (r=\sqrt{x^2+y^2+z^2})$$

が超関数としては何回でも微分可能であり，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\log|x|=\mathrm{PP}\frac{1}{x}, \tag{11}$$

$$\triangle\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\,\delta\qquad (\delta\equiv\delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)). \tag{12}$$

2°　微分演算は超関数の空間における線形連続演算子である：

$$\lim_{j\to\infty}T_j=T\qquad \text{ならば}\qquad \lim_{j\to\infty}T'_j=T'.$$

それゆえ，ある級数が収束するならば，記号 Σ のなかで項ごとに微分できる．また，

$T(\lambda)$ がパラメータ λ に関して積分可能ならば，$\partial T(\lambda)/\partial x_i$ も λ の同じ領域で確かに積分可能であり，

$$I=\int_{\Lambda} T(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda$$

と置くとき，$\partial T(\lambda)/\partial x_i$ の積分は $\partial I/\partial x_i$ に等しい．

II. δ《関数》の性質

§7. δ(x) の定義

物理学では，いっそう正確な記号 $\delta_{x0}[\varphi]$ よりむしろ記号 $\delta(x-x_0)$ を用いる習慣である．こうして，超関数の概念には目をつむり，いくつかの点に留意しながら，$\delta(x-x_0)$ を普通の関数のように取り扱う．その結果として式がたいそう簡単になる．

$f(x)$ が点 $x=x_0$ においてはっきり定義された関数であるとき，

$$\int f(x)\,\delta(x-x_0)\,\mathrm{d}x \equiv \delta_{x0}[f(x)]=f(x_0) \tag{13}$$

と定義する．それゆえ形式的には

$$\delta(x-x_0)=\begin{cases} 0 & (x\neq x_0 \text{ のとき}) \\ +\infty & (x=x_0 \text{ のとき}) \end{cases},\qquad \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x_0)\,\mathrm{d}x=1 \tag{14}$$

が得られる．$\delta(x-x_0)$ はクロネッカーの記号

$$\delta_{mn}=\begin{cases} 0 & (m\neq n \text{ のとき}) \\ 1 & (m=n \text{ のとき}) \end{cases}$$

の一般化である．

§8. 積分演算子の核の極限として表わすこと

$\delta(x-x_0)$ はつぎのような関数の極限と考えることもできる．それは点 x_0 を囲む小さな領域を除けば目立った値をとらず，この領域ではきわめてはっきりした正の最大値をとり，全空間における積分はいつも 1 に等しい関数である．たとえば

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{\pi}\lim_{L\to\infty}\sin\frac{L(x-x_0)}{x-x_0} \tag{15 a}$$

$$=\frac{1}{\pi}\lim_{\kappa\to\infty}\frac{1-\cos\kappa(x-x_0)}{\kappa(x-x_0)^2} \tag{15 b}$$

$$=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to+0}\frac{\varepsilon}{(x-x_0)^2+\varepsilon^2} \tag{15 c}$$

$$= \lim_{\eta \to 0} \frac{E(x-x_0+\eta)-E(x-x_0)}{\eta}. \tag{15 d}$$

最後の式において，$E(x)$ はヘヴィサイド関数

$$E(x) = \begin{cases} 1 & (x>0 \text{ のとき}) \\ 0 & (x<0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

を表わす（超関数 δ はヘヴィサイド超関数の導関数である）．

性質（15 c）には，つぎの極限の性質が結びつけられる：

$$\lim_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{x-x_0 \pm \mathrm{i}\varepsilon} = \mathrm{PP}\frac{1}{x-x_0} \mp \mathrm{i}\pi\delta(x-x_0). \tag{15 e}$$

§9. 主な性質

関数 $\delta(x)$ の主な性質はつぎのとおりである：

$$\delta(x) = \delta(-x) \tag{16}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \qquad (a \neq 0) \tag{17}$$

$$\delta(g(x)) = \sum_n \frac{1}{|g'(x_n)|}\delta(x-x_n) \qquad \begin{pmatrix} g(x_n)=0, \\ g'(x_n) \neq 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

$$x\,\delta(x) = 0 \tag{19}$$

$$f(x)\,\delta(x-a) = f(a)\,\delta(x-a) \tag{20}$$

$$\int \delta(x-y)\,\delta(y-a)\,\mathrm{d}y = \delta(x-a) \tag{21}$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k. \tag{22}$$

これらすべての等式の意味は，左辺または右辺が x に関する積分記号のなかの因数として現われたとき，互いに置き換えられるということである．超関数の理論によればこれらはすべて厳密に証明される（第I節を参照）．また，十分に滑らかな任意の関数 $f(x)$ と両辺との積を積分すれば等しくなることが示される．これによって等式は形式的に（しかし厳密にではなく）証明される．たとえば関係式（16），（17），（18）は，これらの積分において適当な変数変換を施すことによって示される．（18）では，$g(x)$ のすべての零点に対して和をとらなければならない．この式が意味をもつのは $g(x)$ と $g'(x)$ がけっして同時に0にならないときだけである．たとえば $\delta(x^2)$ は何の意味ももたない．

§10. $\delta(x)$ の導関数

《関数》$\delta(x)$ は何回でも微分できる．その m 階導関数 $\delta^{(m)}(x)$ は性質

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(m)}(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x = (-)^m f^{(m)}(0) \tag{23}$$

によって定められる．この式は点 $x = 0$ において m 回微分可能なすべての関数に対して成り立つ．(15 a)，(15 b)，(15 c) の右辺に現われる関数の第 m 階導関数のどれをとっても，$\delta^{(m)}(x-x_0)$ はその極限とみなされる．つぎの性質は普通の積分法の手続きによって形式的に（しかし論理的にではなく）導かれるが，超関数の理論を用いると厳密に証明することができる．

$$\delta^{(m)}(x) = (-)^m \delta^{(m)}(-x) \tag{24}$$

$$\int \delta^{(m)}(x-y)\, \delta^{(n)}(y-a)\, \mathrm{d}y = \delta^{(m+n)}(x-a) \tag{25}$$

$$x^{m+1} \delta^{(m)}(x) = 0. \tag{26}$$

特別な場合として，第1階導関数 $\delta'(x)$ はつぎの性質をもつ．

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x = -f'(0) \tag{27}$$

$$\delta'(x) = -\delta'(-x) \tag{28}$$

$$\int \delta'(x-y)\, \delta(y-a)\, \mathrm{d}y = \delta'(x-a) \tag{29}$$

$$x\, \delta'(x) = -\delta(x) \tag{30}$$

$$x^2 \delta'(x) = 0 \tag{31}$$

$$\delta'(x) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} k\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}k. \tag{32}$$

III. フーリエ変換[3]

§ 11. 関数のフーリエ変換．定義

$f(x)$ が変数 x の（実または複素）関数であるとき，そのフーリエ変換は——それが存在すれば——関数

$$F(u) \equiv \mathcal{F}[f] = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha ux} f(x)\, \mathrm{d}x \tag{33}$$

である．ただし α は一度決めれば変えない定数とする（波動力学では $\alpha = 1/\hbar$ にとる）．収束に関するいくつかの条件にはあとで立ち入ることにし，今はこれを仮定すれば，$f(x)$ は $F(u)$ から逆フーリエ変換によって導き出される．すなわち

---

(3) L. SCHWARTZ, 前掲書 (292 頁注(1)) を参照．また E. C. TITCHMARSH, *Introduction to the Theory of Fourier Integrals*, 第2版, Oxford, 1948 を参照．

$$f(x) = \mathscr{F}^{\dagger}[F] = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha u x} F(u)\,\mathrm{d}u. \tag{33†}$$

もっと一般に，$f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ が n 変数 $x_1, \cdots, x_n$ の関数であるとき，そのフーリエ変換は

$$\begin{aligned} F(u_1, \cdots, u_n) &\equiv \mathscr{F}[f] \\ &= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}n} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(u_1 x_1 + \cdots + u_n x_n)} f(x_1, \cdots, x_n)\,\mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n \end{aligned} \tag{34}$$

であり，逆変換は

$$\begin{aligned} f(x_1, \cdots, x_n) &\equiv \mathscr{F}^{\dagger}[F] \\ &= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}n} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(u_1 x_1 + \cdots + u_n x_n)} F(u_1, \cdots, u_n)\,\mathrm{d}u_1 \cdots \mathrm{d}u_n \end{aligned} \tag{34†}$$

によって定められる．f のフーリエ変換が存在するとき，

$$\mathscr{F}[f(cx_1, \cdots, cx_n)] = \frac{1}{|c|^n} F\left(\frac{u_1}{c}, \cdots, \frac{u_n}{c}\right) \qquad (c\ \text{は任意の定数}) \tag{35}$$

が得られる．同様にして，同じ仮定の下に，

$$\mathscr{F}^{\dagger}[F(cu_1, \cdots, cu_n)] = \frac{1}{|c|^n} f\left(\frac{x_1}{c}, \cdots, \frac{x_n}{c}\right) \qquad (c\ \text{は任意の定数}) \tag{35†}$$

が成り立つ．

今後はつねに，1変数の関数（または超関数）のフーリエ変換を考え，その主な性質を証明なしに述べる．1次元フーリエ変換に関するこれらの性質はいずれも容易に任意の次元に拡張される．

§12. 積分可能な関数

積分可能な関数 $f(x)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|\,\mathrm{d}x < \infty\right)$ はすべてフーリエ変換

$$F(u) = \mathscr{F}[f]$$

をもつ．$F(u)$ は

i) 連続．

ii) 有界：$|F(u)| \leqslant \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|\,\mathrm{d}x$　（u は任意）．

iii) 無限遠で 0：$F(u) \xrightarrow[|u|\to\infty]{} 0.$

$f(x)$ が m 回連続的に微分可能で，初めの m 個の導関数が積分可能ならば，

$$\mathscr{F}[f^{(m)}] = (\mathrm{i}\alpha u)^m F(u). \tag{36}$$

$x^m f(x)$ が積分可能ならば，$F(u)$ は m 回連続的に微分可能で，

$$F^{(m)}(u) = \mathcal{F}[(-\mathrm{i}\alpha x)^m f(x)]. \tag{37}$$

(変換 $\mathcal{F}^\dagger$ の性質を導き出すには，上の各式において i を $-$i に変えればよい).

§13. χ 関　数

われわれが $\chi(x)$ で表わすのは，何回でも微分可能で，すべての導関数とともに漸近的に〔$|x|\to\infty$ のとき〕0に近づき，その速さが $|x|$ のどんな〔負の〕累乗より速い関数である．すなわち

$$\text{任意の } m \text{ と } l \text{ に対して} \qquad |x|^l\chi^{(m)}(x) \xrightarrow[|x|\to\infty]{} 0.$$

もっと一般に，$\chi(x_1, \cdots, x_n)$ は何回でも微分可能で，任意の l, m と任意の $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ $(\alpha_1+\cdots+\alpha_n = m)$ に対して

$$R^l \frac{\partial^m \chi}{\partial x_1^{\alpha_1}\partial x_2^{\alpha_2}\cdots\partial x_n^{\alpha_n}} \xrightarrow[R\to\infty]{} 0 \qquad (R\equiv(x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2)^{1/2})$$

となるような n 変数の関数を表わす．

第I節の関数 φ は特殊な χ 関数である．逆に，χ 関数がすべて φ 型の関数であるとは限らない（例：e^{-R^2}).

χ 関数は積分可能であるから，§12 にあげた性質はこれにも適用される．その他に，つぎの結果が得られる．

χ 関数のフーリエ変換 $\mathcal{F}\chi$，逆フーリエ変換 $\mathcal{F}^\dagger\chi$ はともに（変数 $u_1, u_2, \cdots, u_n$の）χ 関数である．さらにこのフーリエ変換は<u>相反性</u>をもつ：

$$\mathcal{F}\mathcal{F}^\dagger\chi = \mathcal{F}^\dagger\mathcal{F}\chi = \chi$$

($\mathcal{F}\mathcal{F}^\dagger\chi$ は $(\mathcal{F}^\dagger\chi)$ のフーリエ変換を意味する).

§14. 超関数のフーリエ変換．定義

T が超関数であるとき，そのフーリエ変換 $\mathcal{F}T$ は汎関数

$$\mathcal{F}T[\varphi] = T[\mathcal{F}\varphi]$$

によって定義され，フーリエ逆変換は汎関数

$$\mathcal{F}^\dagger T[\varphi] = T[\mathcal{F}^\dagger\varphi]$$

によって定義される．$\mathcal{F}\varphi$, $\mathcal{F}^\dagger\varphi$ は必ずしも φ 型の関数でないから，汎関数 $T[\mathcal{F}\varphi]$, $T[\mathcal{F}^\dagger\varphi]$ の値が存在しないこともありうる．このときには，T はフーリエ変換あるいは逆フーリエ変換をもたない．

関数 $f(x)$ に対応する超関数を $\hat{f}$ とし，$f(x)$ のフーリエ変換が存在すると仮定してこれを $F(u)$ とすれば，

$$\mathscr{F}\hat{f}[\varphi]=\hat{f}[\mathscr{F}\varphi]=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\left\{\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha ux}\varphi(u)\,\mathrm{d}u\right\}\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(u)\left\{\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha ux}f(x)\,\mathrm{d}x\right\}\mathrm{d}u=\hat{F}[\varphi].$$

したがって，超関数 $\hat{f}$ のフーリエ変換は関数 f のフーリエ変換に伴う超関数 $\hat{F}$ である．

§15. 緩増加超関数

緩増加超関数（distribution tempérée）とは，関数 χ の線形連続汎関数のことであると定義する．これは特別な超関数である．

第 I 節に述べた超関数の性質はすべて緩増加超関数について言い直される．各命題のなかの関数 φ を関数 χ に置き換えればよい．特に，緩増加超関数は何回でも微分可能で，すべての導関数は緩増加超関数である．

二乗積分可能な関数，全空間で有界な関数，もっと一般に，局所積分可能で緩やかに増加する関数 $f(x)$（二つの正の数 A と α を適当にとれば，$|x|\to\infty$ のとき $|f(x)|\leqslant A|x|^{\alpha}$ が成り立つような関数）は緩増加超関数を定める．δ, δ_{x_0} およびそれらの導関数も緩増加超関数である．

波動力学における固有値問題の解は波動関数すなわち二乗積分可能な関数 $\psi(q_1,\cdots,q_R)$ の線形連続汎関数である．それゆえもちろん関数 χ の線形連続汎関数である．すなわちそれは緩増加超関数である．

緩増加超関数の利点は，そのフーリエ変換がもつ注意すべき性質に由来する：

U_x が（関数 $\chi(x)$ に対して定義された）緩増加超関数ならば，

1° そのフーリエ変換 V_u，逆フーリエ変換 $V_u^{\dagger}$ はつねに存在し，（関数 $\chi(u)$ に対して定義された）緩増加超関数である．これらはそれぞれ

$$V_u[\chi]\equiv\mathscr{F}U_x[\chi]=U_x[\mathscr{F}\chi] \tag{38}$$

$$V_u^{\dagger}[\chi]\equiv\mathscr{F}^{\dagger}U_x[\chi]=U_x[\mathscr{F}^{\dagger}\chi] \tag{38†}$$

によって定められる．

2° 変換 $\mathscr{F}$ と $\mathscr{F}^{\dagger}$ は相反的である：

$$\mathscr{F}^{\dagger}\mathscr{F}U\equiv\mathscr{F}^{\dagger}V=U \tag{39}$$

$$\mathscr{F}\mathscr{F}^{\dagger}U\equiv\mathscr{F}V^{\dagger}=U. \tag{40}$$

3° つぎの法則にしたがって，微分演算は u の掛け算に変換され，逆も成り立つ：

$$\mathscr{F}(U_x^{(m)})=(\mathrm{i}\alpha u)^m V_u \tag{41}$$

$$\mathscr{F}((-\mathrm{i}\,\alpha\,x)^m U_x) = V_u^{(m)}. \tag{42}$$

§ 16. 二乗積分可能な関数

二乗積分可能な関数は緩増加超関数を定める.

ほとんどいたるところで（すなわち測度0の集合を除けばいたるところで）等しい二つの関数は異なるものとみなさないと規約すれば，緩増加超関数のフーリエ変換の性質は二乗積分可能な関数にあてはまる．これらの性質に対してさらに二乗積分可能な関数に特有な性質がつけ加えられる．主な定理はつぎのものである：

定理 I. $f(x)$ が<u>二乗積分可能</u>ならば，積分

$$\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\xi}^{+\xi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha ux} f(x)\,\mathrm{d}x$$

は<u>二乗積分可能な関数</u>

$$F(u) \equiv \mathscr{F} f(x) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \underset{\xi\to\infty}{\mathrm{lmq}} \int_{-\xi}^{+\xi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha ux} f(x)\,\mathrm{d}x \tag{43}$$

に二乗平均収束する(4).

定理 II. $f(x)$ と $F(u)$ との対応はつぎの意味で<u>相反的</u>である：

$$f(x) = \mathscr{F}^{\dagger} F(u) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \underset{\lambda\to\infty}{\mathrm{lmq}} \int_{-\lambda}^{+\lambda} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha ux} F(u)\,\mathrm{d}u. \tag{43†}$$

さらに，点 x の近傍で $f(x)$ が有界変動であるとき，

$$\mathscr{F}^{\dagger} F(u) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{f(x+\varepsilon)+f(x-\varepsilon)}{2}. \tag{44}$$

定理 III. 二乗積分可能な関数 $f(x)$ と $F(u)$ とが互いに他のフーリエ変換であるとする．導関数 $f'(x)$ が二乗積分可能であるならば，そのフーリエ変換は二乗積分可能な $\mathrm{i}\alpha uF(u)$ である．逆に $\mathrm{i}\alpha uF(u)$ が二乗積分可能ならば，$f(x)$ は微分可能で $f'(x)$ は $\mathrm{i}\alpha uF(u)$ の逆フーリエ変換である．同じような性質が対 $xf(x)$ と $(\mathrm{i}/\alpha)F'(x)$ についても存在する.

---

(4) 関数 $\phi(u,\xi)$ が $\xi\to X$ のとき $\phi(u)$ に二乗平均収束（普通の収束より制限が弱い）することをここでは記号

$$\underset{\xi\to X}{\mathrm{lmq}}\ \phi(u,\xi) = \phi(u)$$

で表わす．この意味は

$$\lim_{\xi\to X} \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(u,\xi)-\phi(u)|^2\,\mathrm{d}u = 0,$$

言いかえれば，ほとんどいたるところで $\phi(u,\xi)$ は $\phi(u)$ に近づく（[訳注] この言いかえは数学的には正しくない）.

注意：$f(x)$ を関数とみなせばいたるところで微分できない場合でも，（緩増加）超関数 $\hat{f}'_x$ はつねに存在する．そのフーリエ変換は（緩増加）超関数 $\mathrm{i}\alpha u\hat{F}_u$ である．これを関数とみなすとき，二乗積分可能であるとは限らない．

フーリエ変換は二乗積分可能な関数の内積を保存する（パーセバル）．

定理 IV. 二乗積分可能な関数 $f(x)$，$g(x)$ のフーリエ変換をそれぞれ $F(u)$，$G(u)$ とすれば，

$$\langle g, f\rangle = \langle G, F\rangle \tag{45}$$

が成り立つ．言いかえれば

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} G^*(u)\, F(u)\, \mathrm{d}u.$$

この定理の特別な場合（$f = g$）はノルムの保存

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(u)|^2\, \mathrm{d}u \tag{46}$$

である．

§17. たたみこみから乗法への変換

二つの関数 f，g に対して，関数

$$f\circ g \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-t)\, g(t)\, \mathrm{d}t \tag{47}$$

が存在するとき，これを f と g のたたみこみと定義する．同じように——ここでは具体的な説明を省略するが——二つの超関数のたたみこみを定義することができる(1)．特に

$$\delta\circ T = T \qquad (T\text{ は任意の超関数})$$

$$\delta\circ f = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-t)\, f(t)\, \mathrm{d}t = f(x) \qquad (f\text{ は任意の関数}).$$

たたみこみは可換な演算である：$f\circ g = g\circ f$.

たたみこみの利点はつぎの定理に由来する．

定理 V. 存在を仮定すれば，二つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ のたたみこみは，フーリエ変換として $\sqrt{2\pi/\alpha}\,F(u)\,G(u)$ をもつ．この式において $F(u)$ と $G(u)$ はそれぞれ $f(x)$ と $g(x)$ のフーリエ変換である．またこの変換は相反的である．

特別な場合として，

定理 V—2. $f(x)$ が二乗積分可能な関数，$g(x)$ が積分可能な関数であるとき，それらのフーリエ変換をそれぞれ $F(u)$ および $G(u)$ とすれば，たたみこみ $f \circ g$ と積 $\sqrt{2\pi/\alpha}\ FG$ は二乗積分可能な関数であり，後者は前者のフーリエ変換である．

フーリエ変換表

$f(x) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha ux} F(u)\, du$	$F(u) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha ux} f(x)\, dx$
$f\left(\frac{x}{c}\right)$	$\lvert c \rvert F(cu)$
$f(-x)$	$F(-u)$
$f^*(x)$	$F^*(-u)$
$F(x)$	$f(-u)$
$x f(x)$	$\frac{i}{\alpha} F'(u)$
$f'(x)$	$i\alpha u F(u)$
$f(x-x_0)$	$e^{-i\alpha ux_0} F(u)$
$e^{i\alpha u_0 x} f(x)$	$F(u-u_0)$
$\delta(x)$	$\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$
$\delta(x-x_0)$	$\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\alpha ux_0}$
$E(x) = \begin{cases} 1 & (x>0) \\ 0 & (x<0) \end{cases}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}}\left[\pi\delta(u) - i\,\mathrm{PP}\frac{1}{u}\right]$
$\left(\frac{\kappa}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\kappa^2 x^2}$	$\left(\frac{\alpha}{\kappa\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha^2 u^2/2\kappa^2}$ $\begin{pmatrix}\mathrm{Re}\,\kappa > 0, \\ \mathrm{Re}\,\kappa^2 > 0\end{pmatrix}$
$\frac{E(x+a)-E(x-a)}{\sqrt{2a}} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2a}} & (\lvert x \rvert < a) \\ 0 & (\lvert x \rvert > a) \end{cases}$	$\left(\frac{\alpha a}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sin \alpha au}{\alpha au}$ （a は正の実数）
$\sqrt{\gamma}\, e^{-\gamma\lvert x \rvert}$	$\left(\frac{2\alpha\gamma^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\gamma^2+\alpha^2 u^2}$ $(\mathrm{Re}\,\gamma > 0)$
$i\sqrt{2\gamma}\, e^{-\gamma x} E(x) = \begin{cases} i\sqrt{2\gamma}\, e^{-\gamma x} & (x>0) \\ 0 & (x<0) \end{cases}$	$\left(\frac{\alpha\gamma}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\alpha u - i\gamma}$ $(\mathrm{Re}\,\gamma > 0)$

注意：終りの4行の関数は1に規格化されている：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lvert f(x) \rvert^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \lvert F(u) \rvert^2 du = 1.$$

第1巻索引

サ　行

マ　行

ヤ　行

ラ　行

訳者紹介

小出昭一郎（こいで しょういちろう）

1950年	東京大学理学部物理学科卒業
1957～8年	英国ブリストル大学へ留学
1962～4年	スイスのジュネーブ大学招聘教授
現在	東京大学教養学部教授，理学博士
専攻	物性理論
主要著訳書	「物理数学 I」（朝倉書店） 「量子論」，「量子力学 I，II」（裳華房） ハイゼンベルク「量子論の物理的基礎」（共訳，みすず書房） スレーター「現代物理学」（共訳，好学社）

田村二郎（たむら じろう）

1943年	東京帝国大学理学部数学科卒業 名古屋帝国大学大学院特別研究生， 第一高等学校教授などを経て
1961年	東京大学教養学部教授
1968年	東京大学教養学部長，翌年退官．理学博士
専攻	解析関数論
主要著書	「基礎課程微分積分学」（共著，裳華房） 「解析関数」（裳華房）

メシア量子力学 1

1971年6月15日　第1刷発行　　Printed in Japan
1977年3月10日　第6刷発行

著　者　A.　メ　シ　ア
訳　者　小　出　昭　一　郎
　　　　田　村　二　郎

検印省略

発行所　東京図書株式会社
本　社　東京都新宿区本塩町23　タナカビル
　　　　振替　東京　13803　電話(357)0636～7
営業所　東京都文京区水道2—5 カキビル
　　　　電話 (814) 7818～9

3042-3020-5160

ランダウ＝リフシッツ理論物理学教程

量子力学 ＝非相対論的理論＝ （全2巻）

佐々木・好村・井上 訳　A5判 ①344頁 ¥1800
②378頁 ¥2000

相対論的量子力学 （全2巻）

井上健男 訳　A5判 ①528頁 ¥2800 ②304頁 ¥2200

ランダウ＝リフシッツ物理学小教程

量子力学

好村・井上 訳　B6判 336頁 ¥1400

故ランダウの意欲的なプランによる大学での講義ノートを基に，相対論的理論まで含めて有効な展望と学習ができるように今回新たに編成されたコンパクトな教科書。

M. ヤンマー

量子力学史 （全2巻）

小出昭一郎 訳　A5判 ①264頁 ¥2500 ②248頁 ¥2500

膨大な史実に基づいて量子力学の誕生と発展を綴った野心作。

東京図書